

UNA APLICACION DE LA TEORIA DE PERTURBACIONES EN LA MECANICA CUANTICA ELEMENTAL.

Mauricio García Castañeda. (*)
Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia

Introducción.

En el presente artículo se presentan y discuten algunos resultados obtenidos al hacer uso de la teoría de perturbaciones de primer orden independiente del tiempo, en un problema físico sencillo.

Como punto de partida se toma la conocida caja de potencial infinita unidimensional, y dentro de tal potencial se introducen perturbaciones tales que permiten la realización de cálculos sencillos. Las perturbaciones seleccionadas son escalones de potencial, cuyas alturas, anchos y posiciones dentro de la caja se modifican de manera arbitraria.

Los potenciales así introducidos pueden ser empleados como modelos de moléculas diatómicas homo o heteronucleares, con un electrón ligado, con posibilidades de suyo interesantes en un curso introductorio de Física Cuántica.

Descripción del problema.

Como se mencionó, el punto de partida está representado por los estados ligados de una partícula de masa "m" dentro de un pozo de potencial infinito unidimensional de un ancho dado, a.

Tal potencial puede ser descrito por una función de energía potencial $V(\xi)$, dado por la expresión:

$$V(\xi) = \begin{cases} +\infty & \xi < 0 \\ 0 & 0 \leq \xi \leq a \\ +\infty & \xi > a \end{cases} \quad (1)$$

Los estados estacionarios correspondientes se obtiene de la solución de la ecuación de Schrödinger:

$$((-\hbar^2/2m) d^2/d\xi^2 + V(\xi)) \psi(\xi) = E \psi(\xi) \quad (2)$$

Al utilizar unidades atómicas (1), ésto es, tomar como unidad de longitud el radio de Bohr, como unidad de energía el Rydberg, y como unidad de masa la masa del electrón, es fácil ver que la ecuación (2) se transforma en :

$$\{(-1/M)d^2/dx^2 + V(X)\} \psi(X) = E \psi(X) \quad (3)$$

donde X está en unidades atómicas de distancia, y M es m/m_e , con m_e la masa del electrón.

Si suponemos adicionalmente que el ancho del pozo es un radio de Bohr ($a = a_0 = 1$) y que m es m_e , los valores propios y funciones propias normalizadas de la ecuación (3), vienen dados por los resultados familiares (2):

$$E_n(0) = n^2 \pi^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\psi(x)_n(0) = \sqrt{2} \sin(n \pi X), \quad n=1, 2, \dots \quad (4)$$

En la notación de la ecuación (4) se emplea el superíndice (0) para caracterizar los estados sin perturbar.

En la figura 1, se muestran las gráficas de las primeras cuatro funciones de onda propias de la ecuación (3) adecuadamente normalizadas.

La perturbación que se introduce representa simples escalones de potencial dentro del pozo, cuyas alturas y dimensiones se pueden modificar de manera arbitraria. En general, L_1 y L_2 denotan los límites de la perturbación, mientras que V_p la altura arbitraria del escalón dentro del pozo.

La figura 2 muestra una disposición general de la perturbación dentro del pozo, así como las variables pertinentes.

De acuerdo con la teoría general de las perturbaciones independientes del tiempo y para estados no degenerados, se tiene que la corrección de la energía en primer orden viene dada por la expresión (3):

$$E_n(1) = E_n(0) + \langle \psi_n(0) | H_p | \psi_n(0) \rangle \quad (5)$$

donde H_p representa el operador de la perturbación, y los otros términos, las energías y estados sin perturbar.

De la forma explícita de la perturbación, el cálculo de los elementos matriciales de la anterior ecuación es inmediato, y la expresión final para la corrección de la energía en primer orden resulta ser:

$$E_n(1) = E_n(0) + V_p \{L_2 - L_1 + \sin(2n\pi L_1)/2n\pi - \sin(2n\pi L_2)/2n\pi\} \quad (6)$$

De donde se puede concluir que la corrección en la energía no sólo depende de V_p sino de su ancho ($L_2 - L_1$), así como de la posición relativa de la perturbación dentro del pozo.

Para la corrección en primer orden de la función de onda en el estado

N = 1-2-3-4

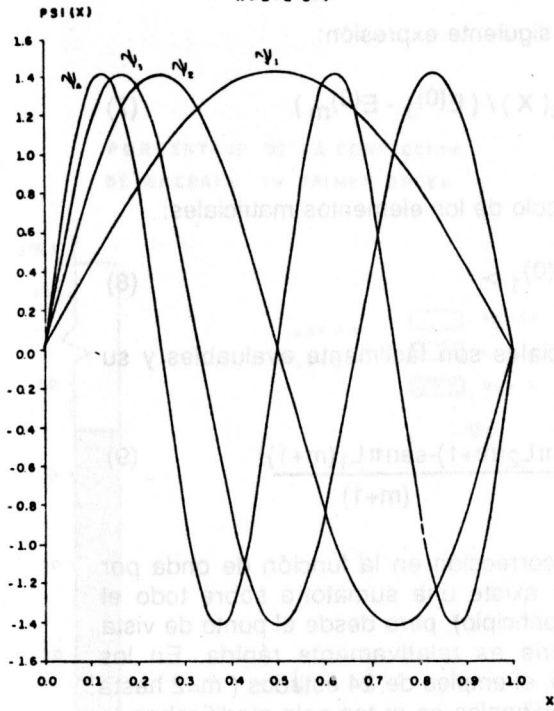


Figura 1

PORCENTAJE DE LA CORRECCION DE ENERGIA EN PRIMER ORDEN

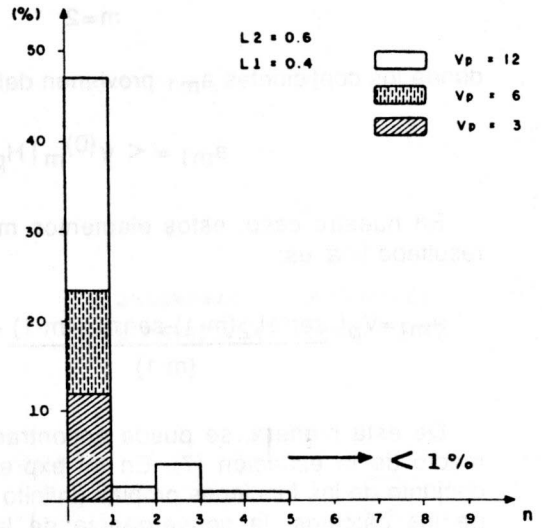


Figura 3a

PORCENTAJE DE LA CORRECCION DE ENERGIA EN PRIMER ORDEN

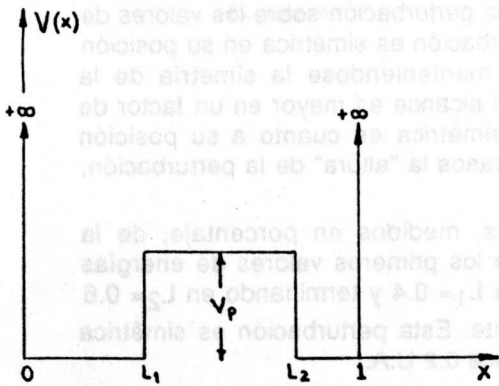


Figura 2

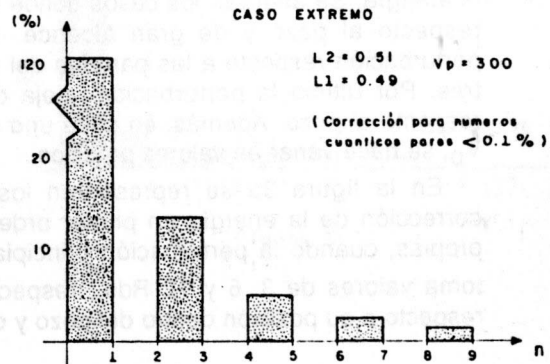


Figura 3b

fundamental, la teoría general proporciona la siguiente expresión:

$$\psi^{(1)}_1(X) = \psi^{(0)}_1(X) + \sum_{m=2}^{\infty} a_{m1} \psi^{(0)}_m(X) / (E^{(0)}_1 - E^{(0)}_m) \quad (7)$$

donde los coeficientes a_{m1} provienen del cálculo de los elementos matriciales:

$$a_{m1} = \langle \psi^{(0)}_m | H_p | \psi^{(0)}_1 \rangle \quad (8)$$

En nuestro caso, estos elementos matriciales son fácilmente evaluables y su resultado final es:

$$a_{m1} = V_p \left\{ \frac{\text{sen} \pi L_2(m-1) - \text{sen} \pi L_1(m-1)}{(m-1)} - \frac{\text{sen} \pi L_2(m+1) - \text{sen} \pi L_1(m+1)}{(m+1)} \right\} \quad (9)$$

De esta manera, se puede encontrar la corrección en la función de onda por medio de la ecuación (7). En tal expresión existe una sumatoria sobre todo el conjunto de las funciones propias (infinito en principio), pero desde el punto de vista de los cálculos, la convergencia de la serie es relativamente rápida. En los resultados presentados en el presente artículo, el empleo de 24 estados ($m=2$ hasta $m=25$) fue suficiente, ya que incrementos adicionales en m tan solo modificaban la cuarta cifra decimal.

Es prudente aclarar en este momento, que los resultados obtenidos para la corrección en la función de onda, no resultan necesariamente normalizados, a pesar de haber empleado las funciones de onda sin perturbar con la normalización adecuada.

Resultados y discusión.

En primer lugar, se presentan los efectos de la perturbación sobre los valores de la energía. Se analizan los casos donde la perturbación es simétrica en su posición respecto al pozo y de gran alcance. Luego, manteniéndose la simetría de la perturbación respecto a las paredes del pozo, el alcance es mayor en un factor de tres. Por último la perturbación deja de ser simétrica en cuanto a su posición respecto al pozo. Además, en cada uno de los casos la "altura" de la perturbación, V_p , se hace variar en valores precisos.

En la figura 3a se representan los efectos, medidos en porcentaje, de la corrección de la energía en primer orden sobre los primeros valores de energías propias, cuando la perturbación principia en $L_1 = 0.4$ y terminando en $L_2 = 0.6$ toma valores de 3, 6 y 12 Rds., respectivamente. Esta perturbación es simétrica respecto a su posición dentro del pozo y de alcance 0.2 U.A.

PORCENTAJE DE LA CORRECCION DE ENERGIA EN PRIMER ORDEN

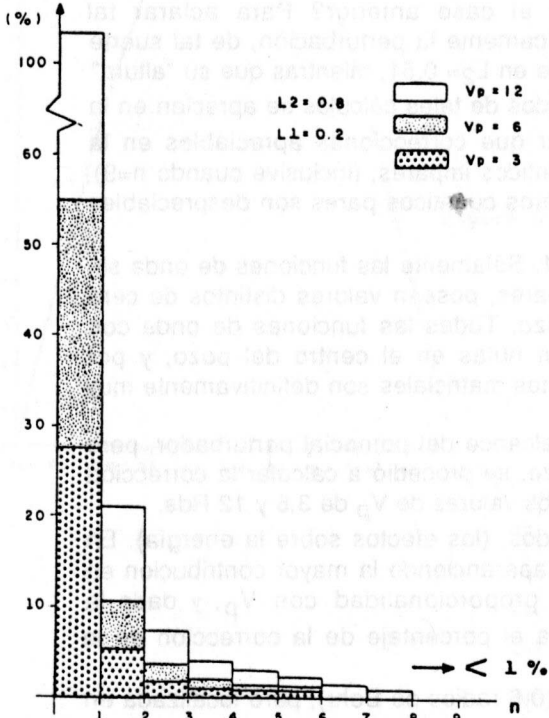


Figura 4

PORCENTAJE DE LA CORRECCION DE ENERGIA EN PRIMER ORDEN

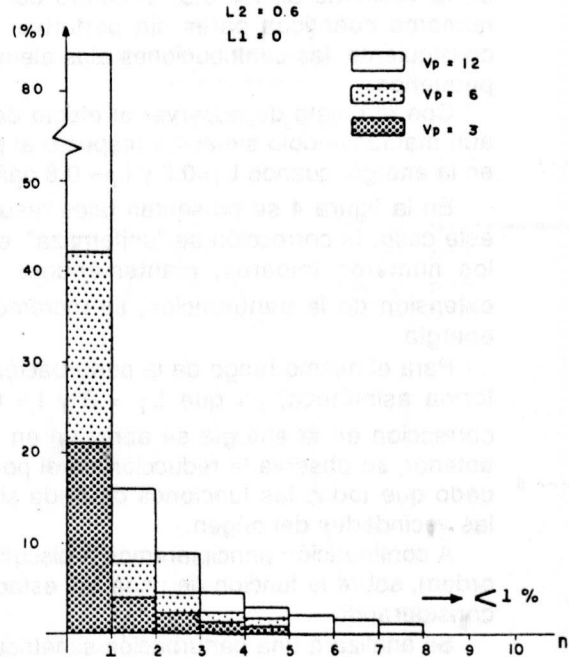


Figura 5

Observando sus efectos sobre la energía del estado fundamental, se aprecia la proporcionalidad de la corrección con V_p , que llega casi a un 50% cuando $V_p=12$ y casi a un 25% con $V_p=6$. Para el segundo estado la corrección es pequeña, pero se incrementa de manera apreciable para $n=3$, manteniéndose la proporcionalidad con V_p en todos los casos. Para números cuánticos mayores que 5, el porcentaje en la corrección es menor del 1% aún para la mayor perturbación considerada.

Por qué tal incremento para $n=3$ en el caso anterior? Para aclarar tal comportamiento se decidió "angostar" drásticamente la perturbación, de tal suerte que su inicio se diera en $L_1=0.49$ y terminase en $L_2=0.51$, mientras que su "altura" tomaba un valor V_p de 300 Rds. Los resultados de tales cálculos se aprecian en la figura 3b. En tal caso, es posible observar que correcciones apreciables en la energía se dan tan solo en los números cuánticos impares, (inclusive cuando $n=9$), mientras que las correcciones para los números cuánticos pares son despreciables (menores que 0.1%).

La explicación se encuentra en la figura 1. Sólomente las funciones de onda sin perturbar cuyos números cuánticos son impares, poseen valores distintos de cero en la vecindad de $X=0.5$, el centro del pozo. Todas las funciones de onda con números cuánticos pares sin perturbar son nulas en el centro del pozo, y por consiguiente, las contribuciones a los elementos matriciales son definitivamente muy pequeños.

Con el objeto de observar el efecto del alcance del potencial perturbador, pero aún manteniéndolo simétrico respecto al pozo, se procedió a calcular la corrección en la energía cuando $L_1=0.2$ y $L_2=0.8$ para los valores de V_p de 3,6 y 12 Rds.

En la figura 4 se presentan tales resultados, (los efectos sobre la energía). En este caso, la corrección se "uniformiza", desapareciendo la mayor contribución en los números impares, manteniéndose la proporcionalidad con V_p , y dada la extensión de la perturbación, se incrementa el porcentaje de la corrección en la energía.

Para el mismo rango de la perturbación, (0.6 radios de Bohr), pero localizada en forma asimétrica, ya que $L_1=0$ y $L=0.6$, los resultados de los cálculos de la corrección en la energía se aprecian en la figura 5. Si se comparan con la figura anterior, se observa la reducción en el porcentaje de corrección, cosa de esperarse dado que todas las funciones de onda sin perturbar poseen valores pequeños en las vecindades del origen.

A continuación principiaremos a discutir los efectos de la perturbación (en primer orden), sobre la función de onda del estado fundamental del problema que estamos considerando.

Se analizará una perturbación simétrica respecto a su posición dentro del pozo y de un alcance de 0.2 U.A. de distancia. La figura 6 presenta tales resultados cuando V_p se hace variar de 0 a 12 Rds, con valores intermedios de 3 y 6 Rds.

Dado el carácter discontinuo del potencial que representa la perturbación, no resulta sorprendente que las funciones de onda y más aún su primera derivada resulten discontinuas en los puntos donde inicia y finaliza la perturbación, lo cual se

ESTADO BASE PERTURBADO

(Sin normalizar)

$L2 = .6$ $L1 = .4$

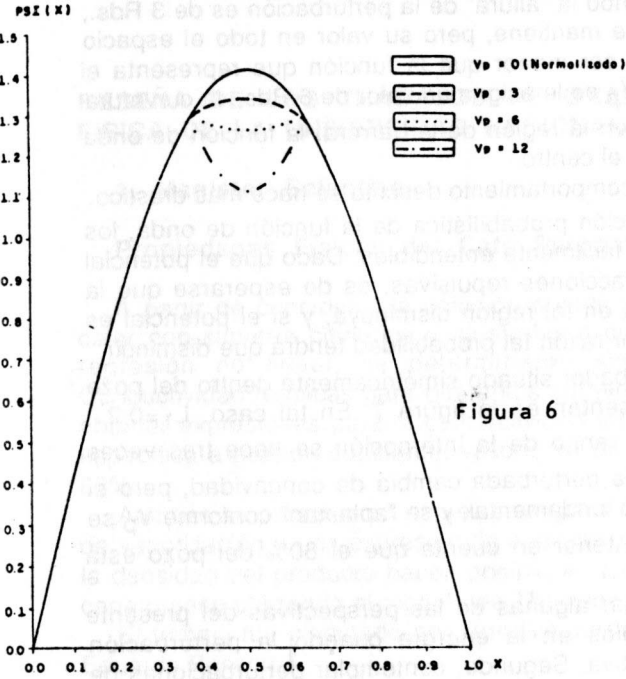


Figura 6

ESTADO BASE PERTURBADO

(Sin normalizar)

$L2 = .8$ $L1 = .2$

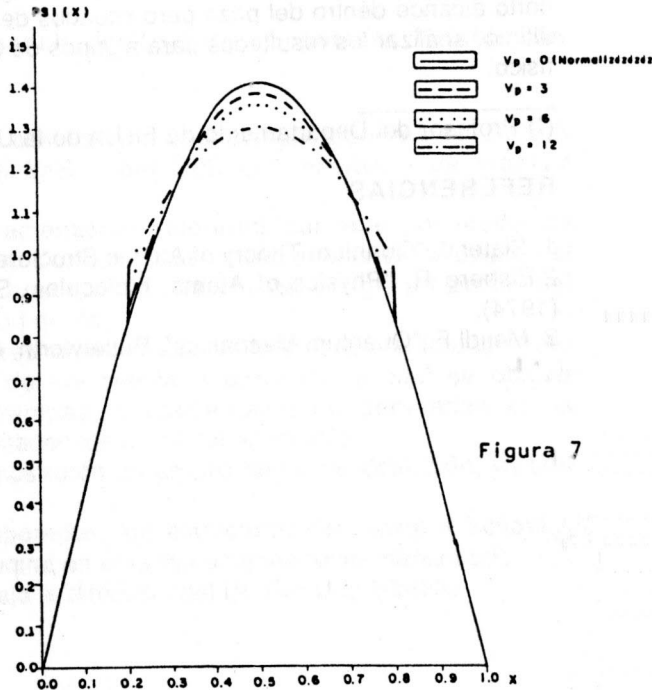


Figura 7

