

TEORIA DE PERTURBACIONES DE BRILLOUIN-WIGNER: OSCILADOR ARMONICO PERTURBADO

D. Campos
Departamento de Física, Universidad Nacional
Santafé de Bogotá

RESUMEN

Un oscilador armónico se somete a una perturbación $\hat{V}(\lambda) = V_0(\lambda) |p=0\rangle \langle p=0|$ donde $|p=0\rangle$ representa un estado de impulso bien definido. Se aplica la teoría de perturbaciones de Brillouin-Wigner para encontrar la solución del problema de valores propios perturbado.

ABSTRACT

An harmonic oscillator is subject to a perturbation $\hat{V}(\lambda) = V_0(\lambda) |p=0\rangle \langle p=0|$, where $|p=0\rangle$ is an eigenket of the momentum operator. The Brillouin-Wigner perturbation theory is applied to solve the eigenvalue equation of the perturbed Hamiltonian.

1. INTRODUCCION

En un artículo anterior [1] se encontraron expresiones que muestran la interrelación formal que existe entre los métodos de Rayleigh-Schrödinger [2], Brillouin-Wigner [3] y el de transformaciones canónicas [4]. En lo que sigue se presenta un breve resumen de los resultados básicos demostrados en ese artículo y usaremos la notación $\{\alpha\}$ para referenciar una ecuación de ese trabajo.

Dentro del contexto de la teoría de perturbaciones independientes del tiempo, el objeto central es solucionar la ecuación de valores propios

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad \{3\} \quad (1)$$

para un operador arbitrario $\hat{H}(\lambda)$ que admite, en principio, una expansión en potencias de un parámetro de perturbación λ :

$$\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}^{(k)} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(\lambda). \quad \{1\} \quad (2)$$

En el método de Rayleigh-Schrödinger (RS), los kets propios y valores propios se determinan considerando en las expansiones exactas

$$E_n(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \quad \{5\} \quad (3)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle \quad \{6\} \quad (4)$$

sólo los N primeros términos (aproximación de orden N), los cuales se evalúan de manera secuencial a partir del problema no perturbado ($\lambda = 0$), según las expresiones ($m \geq 1$)

$$E_n^{(m)} = \sum_{k=1}^m \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(k)} \hat{P}_n^{m-k} | \psi_n^{(m-k)} \rangle \quad (5)$$

$$|\psi_n^{(m)}\rangle = \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \sum_{k=1}^m (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) |\psi_n^{(m-k)}\rangle. \quad \{21-22\} \quad (6)$$

En lo anterior, $\hat{P}_n = \hat{I} - \sum_{r=1}^g |\psi_{nr}^{(0)}\rangle \langle \psi_{nr}^{(0)}|$ es un operador proyección asociado con el subespacio correspondiente al valor propio no perturbado $E_n^{(0)}$, el cual es g veces degenerado; el operador

$$\hat{G}_n^{(0)}(z) := (z - \hat{H}^{(0)})^{-1} = \frac{1}{z - \hat{H}^{(0)}} \quad \{17\} \quad (7)$$

es el resolvente asociado con el operador $\hat{H}^{(0)}$ que describe el problema no perturbado ($\lambda = 0$).

En el método del operador de transformación $\hat{U}_n(\lambda)$, desarrollado en [1], se demuestra que la expansión (4) en potencias de λ se puede sumar hasta orden infinito y que existe un operador $\hat{U}_n(\lambda)$ que transforma el ket propio no perturbado $|\psi_n^{(0)}\rangle$ en el ket propio perturbado $|\psi_n(\lambda)\rangle$, según la relación $|\psi_n(\lambda)\rangle = \hat{U}_n(\lambda) |\psi_n^{(0)}\rangle$. Este último se puede determinar solucionando la ecuación integral tipo Lippmann-Schwinger

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{P}_n \hat{G}_n^{(0)} \hat{W}_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle, \quad \{44\} \quad (8)$$

donde

$$\hat{W}_n(\lambda) := \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k (\hat{H}^{(k)} - E_n^{(k)}) = \hat{V}(\lambda) - (E_n(\lambda) - E_n^{(0)}) \quad \{43\} \quad (9)$$

y

$$\hat{G}_n^{(0)} := \hat{G}^{(0)}(E_n^{(0)} + i\epsilon) \quad \{19\} \quad (10)$$

son respectivamente operadores que describen una *perturbación relativa* y el resolvente asociado con el operador no perturbado $\hat{H}^{(0)}$; el subíndice n se refiere al estado n -ésimo bajo consideración y se sobreentiende que ϵ es diferente de cero pero infinitesimalmente pequeño. Hasta aquí todos los resultados son válidos para operadores arbitrarios, $\hat{H}^{(0)}$ y $\hat{V}(\lambda)$, hermíticos o no hermíticos.

El *método de Brillouin-Wigner* surge como un caso particular del método anterior y se aplica cuando $\hat{H}^{(0)}$ es hermítico. En este procedimiento, el estado perturbado se obtiene solucionando la ecuación integral

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad \{54\} \quad (11)$$

en la cual participa la perturbación $\hat{V}(\lambda)$ y el resolvente

$$\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} := \hat{G}^{(0)}(E_n(\lambda) + i\epsilon), \quad \{20\} \quad (12)$$

asociado con el operador no perturbado $\hat{H}^{(0)}$, pero con el valor propio perturbado $E_n(\lambda)$.

El objetivo del presente artículo es desarrollar un ejemplo concreto en el cual se aplique la teoría de perturbaciones. Formularemos un problema en el cual $\hat{H}^{(0)}$ es hermítico y representa un observable, de tal manera que podemos aplicar indistintamente cualquiera de los tres procedimientos descritos previamente. Usaremos el método de Brillouin-Wigner.

2. APROXIMACIÓN DE $\hat{V}(\lambda)$ POR POTENCIALES SEPARABLES

Antes de formular el problema específico a tratar, es conveniente observar que si $\hat{H}^{(0)}$ representa un observable, sus kets propios

$$\hat{H}^{(0)} |\psi_r^{(0)}\rangle = E_r^{(0)} |\psi_r^{(0)}\rangle, \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

forman una base que permite descomponer el operador unidad en la forma

$$\hat{1} = \sum_{r=1}^{\infty} |\psi_r^{(0)}\rangle \langle \psi_r^{(0)}|. \quad (14)$$

La perturbación $\hat{V}(\lambda)$ se puede descomponer como una combinación de operadores proyección, $|\psi_r^{(0)}\rangle \langle \psi_s^{(0)}|$, según la relación

$$\hat{V}(\lambda) = \hat{1} \hat{V}(\lambda) \hat{1} = \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} |\psi_r^{(0)}\rangle V_{r,s}(\lambda) \langle \psi_s^{(0)}|, \quad (15 a)$$

$$= \left[\begin{array}{c} |\psi_1^{(0)}\rangle \\ |\psi_2^{(0)}\rangle \\ |\psi_3^{(0)}\rangle \\ \dots \end{array} \right] \left[\begin{array}{cccc} V_{11}(\lambda) & V_{12}(\lambda) & V_{13}(\lambda) & \dots \\ V_{21}(\lambda) & V_{22}(\lambda) & V_{23}(\lambda) & \dots \\ V_{31}(\lambda) & V_{32}(\lambda) & V_{33}(\lambda) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \langle \psi_1^{(0)} | \\ \langle \psi_2^{(0)} | \\ \langle \psi_3^{(0)} | \\ \vdots \end{array} \right] \quad (15 \text{ b})$$

donde definimos los elementos matriciales

$$V_{r,s}(\lambda) := \langle \psi_r^{(0)} | \hat{V}(\lambda) | \psi_s^{(0)} \rangle \quad (16)$$

que conforman en (15 b) una matriz de dimensión infinita. Por definición, aproximar la perturbación $\hat{V}(\lambda)$ por un *potencial separable de orden R* [5] consiste en considerar sólo los R primeros términos en cada una de las sumas que intervienen en (15 a); esto es, en reemplazar entidades infinito-dimensionales por entidades finito-dimensionales de dimensión R o $R \times R$, según se trate de vectores o de matrices. Entre más grande sea el valor de R mejor será la aproximación. A propósito, no es necesario usar forzosamente los kets propios de $\hat{H}^{(0)}$ ya que cualquier otra base que se elija conduce a fórmulas con una estructura similar a la previamente indicada, aunque la elección de la base puede ser crucial en garantizar una rápida convergencia del método.

A título de ejemplo, la determinación de la estructura de algunos sistemas atómicos y moleculares se reduce frecuentemente al estudio de los electrones de valencia sin considerar explícitamente los electrones del tronco atómico. Esto es posible por medio de seudopotenciales construidos, por lo general, con la ayuda de operadores proyección [6-9].

3. POTENCIAL SEPARABLE DE ORDEN UNO

Dentro de la metodología general descrita en la sección anterior, una perturbación arbitraria $\hat{V}(\lambda)$ se puede aproximar por un potencial separable de orden uno, $|a\rangle V_a(\lambda) \langle a|$, donde $|a\rangle$ es un elemento de una base y $V_a(\lambda) := \langle a | \hat{V}(\lambda) | a \rangle$ es un parámetro que determina la intensidad de la perturbación. En lo que sigue, con el fin de facilitar la visualización del papel que desempeñan el bra y el ket en el potencial, consideraremos una perturbación de la forma

$$\hat{V}(\lambda) = V_a(\lambda) |a\rangle \langle b|, \quad (17)$$

donde $|a\rangle$ y $|b\rangle$ son estados arbitrarios. El potencial $|a\rangle V_a(\lambda) \langle a|$ es un caso particular que se obtiene haciendo $|b\rangle = |a\rangle$. Si $|b\rangle \neq |a\rangle$ el potencial (17) no es hermítico.

3.1 Determinación de los kets propios

Sea $\hat{H}^{(0)}$ un operador hermítico. En este caso, encontrar el estado $|\psi_n(\lambda)\rangle$ que soluciona la ecuación integral (11), asociada con el método de Brillouin-Wigner, es equivalente a resolver la ecuación de valores propios (1). La ecuación (11) se puede iterar para dar como solución

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{r=1}^{\infty} \left(\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) \right)^r |\psi_n^{(0)}\rangle, \quad \{53\ b\} \quad (18)$$

donde $|\psi_n^{(0)}\rangle$ es el n -ésimo estado del sistema no perturbado ($\lambda = 0$).

Para evaluar la suma infinita que interviene en la ecuación anterior, es conveniente introducir las siguientes entidades auxiliares:

$$\hat{A} := \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) = V_0(\lambda) \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n |a\rangle \langle b| \quad (19)$$

$$V_{r,s} := \langle \psi_r^{(0)} | \hat{V}(\lambda) | \psi_s^{(0)} \rangle = V_0(\lambda) \langle \psi_r^{(0)} | a \rangle \langle b | \psi_s^{(0)} \rangle \quad (20)$$

$$\xi(\lambda) := V_0(\lambda) \langle b | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | a \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kk}}{E_n(\lambda) - E_k^{(0)} + i\epsilon}, \quad (21)$$

donde la última igualdad surgió al usar para la descomposición (14) para el operador unidad y aplicar la ecuación de valores propios (13). En virtud de la relación $\hat{A}^r = \xi^{r-1} \hat{A}$, válida para cualquier r entero positivo, es posible evaluar la suma infinita

$$\sum_{r=1}^{\infty} \left(\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n \hat{V}(\lambda) \right)^r = \frac{1}{\xi} \sum_{r=1}^{\infty} \xi^r \hat{A} = \frac{1}{1-\xi} \hat{A}. \quad (22)$$

En consecuencia, el estado $|\psi_n(\lambda)\rangle$ está dado por

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \frac{V_0(\lambda)}{1-\xi} \langle b | \psi_n^{(0)} \rangle \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n |a\rangle. \quad (23)$$

En virtud de la identidad $\langle \psi_n^{(0)} | \hat{P}_n | a \rangle = 0$, se cumple la condición de normalización

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n(\lambda) \rangle = 1. \quad \{8\} \quad (24)$$

La expresión que hemos encontrado para $|\psi_n(\lambda)\rangle$ se podría haber obtenido igualmente aplicando el procedimiento descrito por Estrada [5] al tratar la ecuación de Lippmann-Schwinger para un potencial separable de rango uno (potencial de Yamaguchi). A

propósito, el estado $|\psi_n(\lambda)\rangle$ no está aún completamente determinado ya que desconocemos el valor propio $E_n(\lambda)$ que interviene en el resolvente $\hat{G}_{n,\lambda}^{(0)}$. Esta es una característica tanto de los métodos de Brillouin-Wigner y del operador de transformación descrito por las ecuaciones (8) y (9). En este último, la cantidad desconocida $E_n(\lambda)$ está involucrada en la perturbación relativa y no en el resolvente.

3.2 Determinación de los valores propios

Para determinar el valor propio $E_n(\lambda)$ hacemos uso de la relación

$$E_n(\lambda) = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) | \psi_n^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) \hat{P}_n | \psi_n(\lambda) \rangle \quad \{23\}$$

$$= E_n^{(0)} + V_{nn} + \frac{V_n(\lambda)}{1 - \xi} \langle b | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}(\lambda) \hat{P}_n \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | a \rangle. \quad (25)$$

Ahora bien, el último producto escalar se puede simplificar en virtud de las relaciones

$$\hat{H}(\lambda) = -\left(E_n(\lambda) - \hat{H}^{(0)}\right) + \left(V(\lambda) + E_n(\lambda)\right) \quad (26)$$

$$\left(z - \hat{H}^{(0)}\right) \hat{G}^{(0)}(z) = \hat{G}^{(0)}(z) \left(z - \hat{H}^{(0)}\right) = \hat{1} \quad (27)$$

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{P}_n | a \rangle = 0, \quad \hat{P}_n^2 = \hat{P}_n, \quad (28)$$

y teniendo en cuenta que $\hat{H}^{(0)}$ conmuta con \hat{P}_n , ya que $\hat{H}^{(0)}$ es hermítico. En consecuencia, la energía $E_n(\lambda)$ se determina por medio de la relación:

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \frac{V_{nn}(\lambda)}{1 - \xi(\lambda)}. \quad (29)$$

Al substituir esta expresión en (21), encontramos que esta última cantidad satisface la ecuación no-lineal

$$\xi(\lambda) = F\left(n, \lambda, \xi(\lambda)\right), \quad (30 a)$$

donde asignamos al estado n -ésimo la función auxiliar

$$F(n, \lambda, z) = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kk}(\lambda)}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)} + \frac{V_{nn}(\lambda)}{1-z}} \quad (30 \text{ b})$$

Al encontrar, para cada valor de λ , la solución de la ecuación no lineal (30 a) y substituir en la expresión (29), obtenemos el valor propio buscado, $E_n(\lambda)$.

La expresión (30) es especialmente importante debido a que $\xi(\lambda)$ se expresa como una suma cerrada en la cual sólo intervienen diferencias de energía del problema no perturbado y elementos diagonales $V_{kk}(\lambda) = V_0(\lambda) \langle \psi_k^{(0)} | a \rangle \langle b | \psi_k^{(0)} \rangle$ asociados con amplitudes de transición entre los estados del sistema no perturbado y los estados $|a\rangle$ y $|b\rangle$ que describen la perturbación. En situaciones prácticas, en la suma (30 b) sólo se consideran los K primeros términos, garantizando que se elige K lo suficientemente grande de tal manera que hay convergencia en el proceso de sumas parciales.

El análisis de los resultados (29-30) para algunos casos particulares es de especial interés:

- (i) Uno de los dos kets ($|a\rangle$ o $|b\rangle$) que participa en la perturbación $\hat{V}(\lambda)$ es ortogonal al estado no perturbado $|\psi_n^{(0)}\rangle$. En este caso, $V_{nn} = 0$ y, como consecuencia de (29), la energía del sistema permanece inmodificada, $E_n(\lambda) = E_n^{(0)}$, sin importar el valor que tome $\xi(\lambda)$. Si $|a\rangle$ es el estado ortogonal a $|\psi_n^{(0)}\rangle$, éste resultado se puede verificar por medio de la relación

$$E_n(\lambda) = \langle \psi_n^{(0)} | \left(\hat{H}^{(0)} + V_0(\lambda) |a\rangle \langle b| \right) | \psi_n(\lambda) \rangle.$$

Si $|b\rangle$ es el estado que es ortogonal a $|\psi_n^{(0)}\rangle$, la situación es más difícil de justificar por medio de la expresión anterior. Sin embargo, se explica debido a que en tal situación la función de onda perturbada coincide con la función de onda no perturbada; esto es, como consecuencia de la relación (23), $|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$.

- (ii) Si la perturbación $\hat{V}(\lambda)$ se construye de tal manera que $|a\rangle = |b\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$, entonces $V_{nn} = V_0(\lambda)$ y $V_{kk} = 0$ para cualquier estado propio k asociado con un nivel diferente a $E_n^{(0)}$. En consecuencia $\xi(\lambda) = 0$ y, por lo tanto (29) conduce a $E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + V_{nn}$.

- (iii) En un intento de generar una estructura no lineal en la ecuación de valores propios, se podría construir la perturbación $\hat{V}(\lambda)$ especificando $|a\rangle$ como el estado

desconocido $|\psi_n(\lambda)\rangle$. En este caso, la ecuación de valores propios para $\hat{H}(\lambda)$ adopta la forma

$$\left(\hat{H}^{(0)} + V_0(\lambda) |b\rangle \langle b| \right) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$$

o, lo que es equivalente,

$$\hat{H}^{(0)} |\psi_n(\lambda)\rangle = \left(E_n(\lambda) - V_0(\lambda) \langle b | \psi_n(\lambda) \rangle \right) |\psi_n(\lambda)\rangle.$$

Comparando esta relación con la ecuación de valores propios para $\hat{H}^{(0)}$ se deduce que los kets propios de ambas ecuaciones coinciden pero que los valores propios están determinados por el estado $|b\rangle$, según las relaciones:

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + V_0(\lambda) \langle b | \psi_n^{(0)} \rangle.$$

Este resultado, que equivale a tener $\xi(\lambda) = 0$, ha conducido en principio a valores propios complejos debido a que, por lo general, el producto escalar $\langle b | \psi_n^{(0)} \rangle$ es un número complejo.

4. PARTICULARIZACION A UN OSCILADOR ARMONICO

En esta parte del artículo aplicaremos los resultados de la sección anterior a un caso particular, a saber. Consideraremos un oscilador armónico de masa m y frecuencia ω en el estado identificado por el número cuántico n , cuya función de onda en representación de coordenadas es

$$\begin{aligned} \psi_n^{(0)}(q) &:= \varphi_n(q) = \langle q | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\kappa}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\kappa q)^2\right] H_n(\kappa q), \end{aligned} \quad (31)$$

donde

$$\kappa = \frac{1}{q_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (32)$$

es el inverso de la unidad de longitud (q_0) característica del sistema. La energía asociada con este estado es

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega. \quad (33)$$

El oscilador se somete a una perturbación $\hat{V}(\lambda) = V_0(\lambda) |a\rangle \langle b|$ tal que los kets $|a\rangle$ y $|b\rangle$ son estados de impulso bien definido (\hat{p} es el operador que representa el impulso lineal de la partícula):

$$|a\rangle = |p_a\rangle, \quad \hat{p} |p_a\rangle = p_a |p_a\rangle \quad (34)$$

$$|b\rangle = |p_b\rangle, \quad \hat{p} |p_b\rangle = p_b |p_b\rangle. \quad (35)$$

En primer lugar debemos evaluar los elementos matriciales

$$V_{r,s}(\lambda) := \langle \psi_r^{(0)} | \hat{V}(\lambda) | \psi_s^{(0)} \rangle = V_0(\lambda) \langle \psi_r^{(0)} | p_a \rangle \langle p_b | \psi_s^{(0)} \rangle, \quad (36)$$

donde r y s son números cuánticos análogos a n , de tal manera que toman los valores 0, 1, 2, ... El producto escalar $\langle p_b | \psi_s^{(0)} \rangle$ no es otra cosa que la función de onda del oscilador armónico en representación de impulsos, asociada con el número cuántico s [10]:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_s(p) &= \langle p | \psi_s^{(0)} \rangle = \langle p | s \rangle \\ &= (-i)^s \sqrt{\frac{\chi}{2^s s! \sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\chi p)^2\right] H_s(\chi p), \end{aligned} \quad (37)$$

donde

$$\chi = \frac{1}{p_0} = \frac{1}{\sqrt{\hbar m \omega}} \quad (38)$$

es el inverso de la unidad de impulso lineal (p_0) característica del sistema. Por lo tanto, los elementos matriciales adoptan la forma

$$V_{r,s}(\lambda) = V_0(\lambda) \tilde{\Phi}_r^*(p_a) \tilde{\Phi}_s(p_b). \quad (39)$$

En lo que sigue consideraremos el caso particular en el cual elegimos los impulsos p_a y p_b de tal manera que coincidan en su valor numérico, $p_a = p_b := p$. En este caso, los elementos diagonales

$$V_{k,k}(\lambda) = V_0(\lambda) |\tilde{\Phi}_k(p)|^2 \quad (40)$$

son proporcionales a la densidad de probabilidad de encontrar el oscilador con impulso p cuando el oscilador se encuentra en el estado mecánico cuántico k . La determinación de la influencia de la perturbación sobre los niveles de energía se reduce entonces a solucionar la ecuación no lineal

$$\xi(\lambda) = F(n, \lambda, \xi(\lambda)) \quad (41)$$

donde hemos definido las abreviaciones

$$r_k(\lambda) := V_a(\lambda) |\Phi_k(p)|^2 \quad (42)$$

y observado que (30 b) se reduce a

$$F(n, \lambda, z) = \sum_{k \neq n} \frac{r_k(\lambda)}{(n-k) \hbar \omega + \frac{r_n(\lambda)}{1-z}} \quad (43)$$

Por comodidad escogemos $\hbar = 1$, $\omega = 1$, $V_0 = 1$ y elegimos una perturbación tal que $p_a = p_b = p = 0$. Como las funciones impares del sistema no perturbado se anulan en el origen ($p = 0$), los valores propios impares permanecen inmodificados como consecuencia de la expresión (21) para la energía perturbada y de la relación $V_{n,n} = 0$. En consecuencia, es suficiente preguntarnos por la manera como se modifican los valores propios correspondientes a valores pares del número cuántico n .

La Figura-1 se calculó para el estado base ($n = 0$) incluyendo los 20 primeros estados de la suma (43). La gráfica muestra el comportamiento típico de la función $F(n, x, z)$ y de la recta $y = z$. El punto de cruce de estas dos curvas se puede tomar como valor inicial para solucionar numéricamente la ecuación $\xi(\lambda) = F(n, \lambda, \xi(\lambda))$ aplicando métodos estándar [11]. El mismo procedimiento se usó para estados excitados. Intrigados por las oscilaciones que se observan para valores grandes de z se calculó la función empleando los 30 primeros estados de la suma (43), pero no se observó ninguna modificación en el comportamiento de la función. Esto significa que las oscilaciones son un efecto real y que no están asociadas con el cálculo de la suma (43) mediante un número finito de términos.

Las Figuras-2 muestran la manera como cambia la energía del estado base y de los primeros estados excitados asociados con n par. La perturbación no afecta la energía asociada con los estados impares (n impar) debido a que las funciones de onda del oscilador armónico en representación de impulsos se anulan en el origen, $p = 0$.

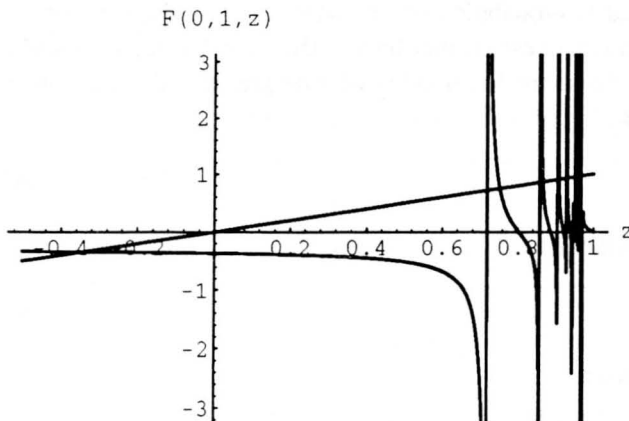


Figura-1. Los puntos de cruce de las funciones $y = F(0, 1, z)$, $y = z$ permiten estimar un valor inicial para solucionar la ecuación no lineal $\xi(\lambda) = F(0, \lambda, \xi(\lambda))$.

Para determinar las funciones de onda es conveniente tomar la representación de coordenadas de la ecuación (23), lo cual conduce a

$$\psi_n(q, \lambda) = \langle q | \psi_n(\lambda) \rangle = \varphi_n(q) + \frac{V_n(\lambda)}{1 - \xi(\lambda)} \langle q | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | p \rangle \Phi_n(p) \quad (44)$$

donde $\varphi_n(q)$ es la función de onda del oscilador armónico en representación de coordenadas y , en el caso particular bajo consideración, $p = 0$. El producto escalar $\langle q | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | p \rangle$ se evalúa haciendo uso de la descomposición (3) del operador unidad en término de los estados propios del sistema no perturbado

$$\langle q | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | p \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \langle q | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} | \psi_r^{(0)} \rangle \langle \psi_r^{(0)} | \hat{P}_n | p \rangle,$$

de tal manera que, como consecuencia de la relación

$$\langle \psi_r^{(0)} | \hat{P}_n | p \rangle = \left\langle \psi_r^{(0)} \left| \left(\hat{I} - |\psi_n^{(0)}\rangle \langle \psi_n^{(0)}| \right) \right| p \right\rangle = \Phi_r^*(p) - \delta_{r,n} \Phi_n^*(p),$$

podemos escribir

$$\langle q | \hat{G}_{n,\lambda}^{(0)} \hat{P}_n | p \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{E_n(\lambda) - E_r^{(0)}(\lambda)} \varphi_r(q) \left(\Phi_r^*(p) - \delta_{r,n} \Phi_n^*(p) \right).$$

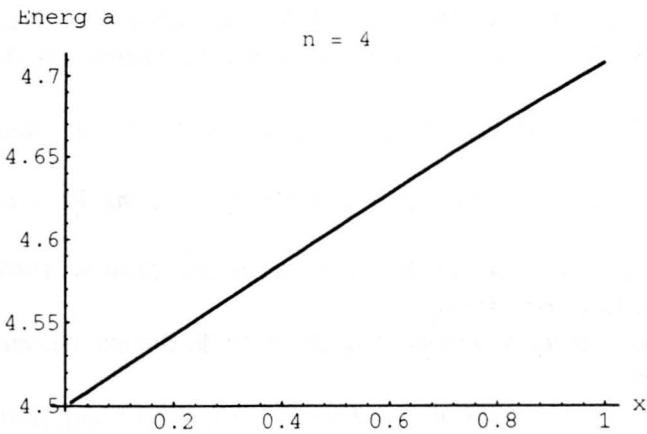
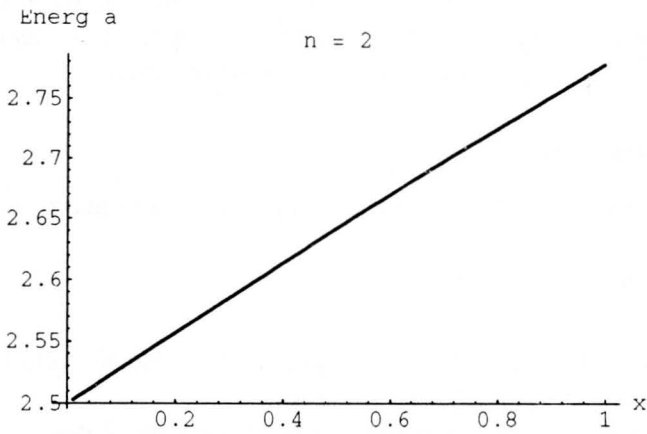
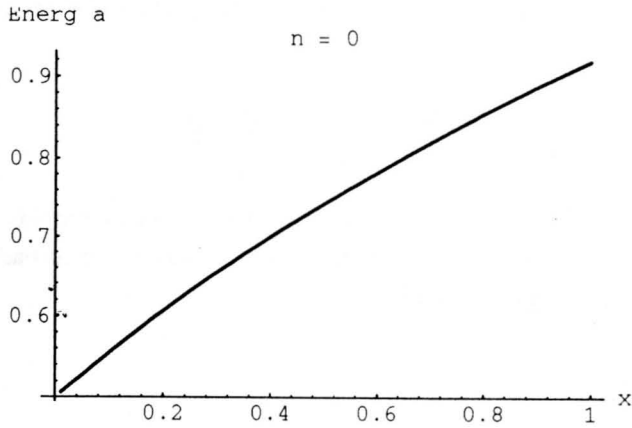


Figura-2. Energía de los primeros estados de un oscilador armónico sujeto a una perturbación $\hat{V}(\lambda) = \lambda V_0 |p=0\rangle \langle p=0|$, como función del parámetro $\lambda = x$.

En conclusión, las funciones propias del sistema perturbado están dadas por la expresión

$$\Psi_n(q, \lambda) = \varphi_n(q) + \frac{V_n(\lambda)}{1 - \xi(\lambda)} \Phi_n(p) \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\Phi_r^*(p) - \delta_{r,n} \Phi_n^*(p)}{E_n(\lambda) - E_r^{(0)}} \varphi_r(q) \quad (45)$$

la cual representa una expansión en términos de las funciones propias no perturbadas $\varphi_r(q)$. Cuando n es impar y $p = 0$, las funciones propias no perturbadas permanecen inmodificadas debido a que $\Phi_n(p=0) = 0$.

5. CONCLUSIÓN

Hemos aplicado la teoría de perturbaciones de Brillouin-Wigner a un sistema que permite una solución analítica para las funciones propias. Los valores propios se determinan numéricamente solucionando una ecuación no-lineal.

AGRADECIMIENTOS

El autor agradece al Profesor Hernán Estrada sus valiosos comentarios y sugerencias.

REFERENCIAS

- [1] Sakurai, J.J., *Modern Quantum Mechanics*. 1985, Menlo Park, California: The Benjamin/Cummings Publishing Company.
- [2] Merzbacher, E., *Quantum Mechanics*. 1961, New York: Wiley.
- [3] Davydov, A.S., *Quantum Mechanics*. 1966, Ann Arbor: NEO Press.
- [4] Jones, P.B., *The Optical Model in Nuclear and Particle Physics*. 1963, New York: Interscience.
- [5] Micha, D.A., *Optical Potentials in Molecular Collisions*. *J. Chem. Phys.*, 1969. **50**: p. 722.
- [6] Volkin, H., *Generalized Potentials for Inelastic Scattering*. *Phys. Rev.*, 1967. **155**: p. 1177.
- [7] Ziman, J.M., *Elements of Advanced Quantum Theory*. 1969, Cambridge: Cambridge University Press.
- [8] Campos, D., *Teoría de Sistemas Cuánticos*. 1989, Bogotá: Universidad Nacional de Colombia.
- [9] Joachain, C.J., *Quantum Collision Theory*. 1983, Amsterdam: North-Holland.
- [10] Press, W.H., et al., *Numerical Recipes*. 1986, Cambridge: Cambridge University Press.
- [11] Campos, D., *Interrelación entre los métodos de Rayleigh-Schrödinger, Brillouin-Wigner y el de transformaciones canónicas*. *Momento 9*: p 5, 1993. .

- [12] Estrada, H., *Potenciales No-Locales Separables*. 1990, Universidad Nacional, Dpto. de Física:
- [13] Bardsley, J.N., *Pseudopotentials in Atomic and Molecular Physics*. Cases Studies in Atomic Physics, 1974. **4(5)**: p. 299-368.
- [14] Fuentealba, P., *Die Rolle der Rumpfpolarisierung in Pseudopotentialverfahren*. 1984, Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart:
- [15] Fuentealba, P., *et al.*, *Pseudopotential calculations for alkaline-earth atoms*. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1985. **18**: p. 1287.
- [16] Simons, G., *New Model Potential for Pseudopotential Calculations*. J. Chem. Phys., 1971. **55**: p. 756.
- [17] Wolfram, S., *Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer*. 1991, Redwood City: Addison-Wesley.