Mecánica Cuántica I
Auxiliar: Métodos Variacionales

Profesor: Hugo Arellano Auxiliar: Sebastián Díaz

11/06/2008

Método Variacional: el resultado que ocuparemos es la sencilla desigualdad

$$E_o \leq \frac{\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle}$$

donde E_o es la energía del estado fundamental del sistema descrito por el hamiltoniano $\hat{H}$ y $\mid \psi \rangle$ es CUALQUIER función del espacio de Hilbert (el que es generado por los autoestados del hamiltoniano).

¿Para qué sirve esta desigualdad? Para obtener estimaciones de la energía del estado fundamental de algún sistema. La manera astuta y sabia de ocupar este resultado es postular una función de prueba que dependa de parámetros (nosostros usaremos sólo uno) y con ella calcular

$$E[\lambda] \equiv \frac{\langle \psi_\lambda \mid \hat{H} \mid \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda \mid \psi_\lambda \rangle}$$

y así tendremos

$$E_o \leq E[\lambda]$$

finalmente minimizaremos la función de λ, $E[\lambda]$ con el objetivo de encontrar la cota superior más pequeña de la familia dada por $E[\lambda]$.

P1 Oscilador Armónico

Conocemos perfectamente que el estado fundamental del oscilador armónico está descrito por una gaussiana y que su energía es $E_o = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Pero hagámosnos los lesos por un rato...

Se nos pide encontrar la mejor aproximación posible para la energía del estado fundamental del sistema descrito por el hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

usando la función de prueba

$$\psi_\lambda(x) = e^{-\lambda x^2}$$

Partamos calculando

$$
\begin{aligned}
E[\lambda] &= \frac{\langle \psi_\lambda \mid \hat{H} \mid \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda \mid \psi_\lambda \rangle} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_\lambda^*(x) \hat{H} \psi_\lambda(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_\lambda^*(x) \psi_\lambda(x) dx}
\end{aligned}
$$

Primero el denominador

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}$$

y ahora el numerador

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1}{8m} \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \left[4\hbar^2 \lambda + \frac{m^2\omega^2}{\lambda} \right]$$

Luego

$$E[\lambda] = \frac{1}{8m} \left[4\hbar^2 \lambda + \frac{m^2\omega^2}{\lambda} \right]$$

Ahora buscamos al λ_o tal que $E'[\lambda_o] = 0$. Esto no lleva a resolver una ecuación de segundo grado que tiene como soluciones $\lambda_o = \pm \frac{m\omega}{2\hbar}$. Estos valores nos entregan las energías

$$E[\lambda_o = \pm \frac{m\omega}{2\hbar}] = \pm \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Claramente $\lambda_o = \frac{m\omega}{2\hbar}$ nos entrega el mínimo que buscábamos. Why?? Porque sabemos que para sistemas unidimensionales, la energía del estado fundamental es mayor que el valor mínimo del potencial. En este caso el valor mínimo del potencial es 0, así que $E_o > 0$; luego no puede ser que $E_o \leq -\frac{1}{2}\hbar\omega$. Otra manera de descartar la solución $\lambda_o = -\frac{m\omega}{2\hbar}$ es fijarse en la función de prueba que nos quedaría:

$$\psi_{\lambda_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}}(x) = e^{\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Esta función no es L^2 ya que diverge para $x \to \pm\infty$.

Finalmente tenemos que

$$E_o \leq \frac{1}{2} \hbar\omega$$

No es sorpresa que hayamos encontrado el valor exacto de la energía del estado fundamental del oscilador armónico: usamos como función de prueba la autofunción correspondiente al estado fundamental.

P2 Potencial Lineal

Una partícula de masa m que se mueve en una dimensión en el semi-espacio derecho, está sometida al potencial $V(x)$ dado por

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{cc} \infty & x \leq 0 \\ Fx & x > 0 \end{array} \right.$$

donde F es una constante real positiva. Use el método variacional para encontrar una estimación de la energía del estado fundamental. ¿Cómo se comporta la función de onda en los límites $x \to 0$ y $x \to \infty$?

Solución

Puesto que el potencial es infinito para $x \leq 0$, la función de onda es nula en $(-\infty, 0]$. Luego, por continuidad, ésta debe tender a 0 cuando $x \to 0$ y también cuando $x \to \infty$ si queremos que sea L^2. Dicho esto postulamos la siguiente función de prueba dependiente del parámetro λ:

$$\psi_\lambda(x) = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & x \leq 0 \\ xe^{-\lambda x} & x > 0 \end{array} \right.$$

En $x > 0$ el hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + Fx$$

Ahora calculemos $E[\lambda]$. El numerador es

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\lambda^*(x)\hat{H}\psi_\lambda(x)dx &= \int_0^\infty xe^{-\lambda x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + Fx\right)xe^{-\lambda x}dx \\ &= \frac{1}{8m}\left[\frac{\hbar^2}{\lambda} + \frac{3mF}{\lambda^4}\right] \end{aligned}$$

y el denominador

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\lambda^*(x)\psi_\lambda(x)dx &= \int_0^\infty x^2 e^{-2\lambda x}dx \\ &= \frac{1}{4\lambda^3} \end{aligned}$$

Así:

$$E[\lambda] = \frac{1}{2m}\left[\hbar^2\lambda^2 + \frac{3mF}{\lambda}\right]$$

Ahora buscamos λ_o tal que $E'[\lambda_o] = 0$. Teniendo en mente que sólo nos interesan soluciones $\lambda_o > 0$, sino $\psi_{\lambda_o}(x)$ no sería L^2, obtenemos:

$$\lambda_o = \left[\frac{3mF}{2\hbar^2}\right]^{1/3}$$

Finalmente la estimación para la energía del estado fundamental es

$$E_o \leq E[\lambda_o] = \left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2 F^2}{m}\right)^{1/3}$$