Mecánica Cuántica I

Guía 6 – Mayo de 2014
Solución (o Comentario) de Problemas de la guía 6
G.A. Raggio

Problema 1: Una partícula de masa m está restringida a moverse en una dimensión entre $x = -L/2$ y $x = L/2$, donde el potencial es nulo. Obtenga una cota para la energía del estado fundamental utilizando la función de prueba $\Psi_p(x) = a(x - L/2)(x + L/2)$. Compare con la solución exacta.

Comentarios: Observe que Ψ_p incorpora propiedades del "estado fundamental" (que es único) que conocemos a priori como la ausencia de nodos (fuera de los obligados por la condición de contorno en $\pm L/2$) y la paridad. Es inmediato que la autofunción de mínima energía es proporcional a $\Phi(x) := \cos(\pi x/L)$ y dicha energía es $\hbar^2\pi^2/(2mL^2)$. Obtendrá una cota superior para π.

Problema 2: Considere el potencial unidimensional

$$V(x) = V_o\left(\frac{x^2}{2} - J\right)\exp\{-ax^2\}\ ,\ ; a, J, V_o > 0\ .$$

a) Determine (sin explicitar ninguna función de onda) una condición de existencia de estado ligado.
b) Utilice la función de prueba $\Psi(x) \propto \exp\{-bx^2\}$ ($b > 0$) para estimar la energía fundamental. Calcule la curva de existencia de estado ligado y compare con la obtenida en el punto a).

Solución: He mencionado en las clases que: *si el Hamiltoniano unidimensional*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

cumple:
i) H es acotado por debajo; o sea: $\langle\Psi, H\Psi\rangle > C$ para todo Ψ de norma 1 en el dominio de H, donde C es una constante real;
ii) $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0$;
iii) $\int_{\mathbb{R}} V(x)\,dx < 0$;
iv) $\int_{\mathbb{R}} x^2|V(x)|\,dx$ existe;
entonces H soporta al menos un estado ligado.

Demostraré y comentaré esto como primera parte de la solución. Usaré las siguientes fórmulas de integración definida:

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-px^2}\,dx = \sqrt{\pi/p}\ ,\quad \int_{\mathbb{R}} x^2e^{-px^2}\,dx = \frac{1}{2p}\sqrt{\pi/p}$$

válidas para $p > 0$.

Las condiciones (i)-(iii) son suficientes para garantizar que el espectro discreto de H si no es vacio está por debajo de 0. Tomemos $\Psi_\alpha = e^{-\alpha x^2}$ con $\alpha > 0$. Entonces –las siguientes integrales serán todas sobre la recta real salvo que se especifiquen los límites de integración explicitamente–

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\int \Psi_\alpha(x)\Psi_\alpha''(x)\,dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int |\Psi_\alpha'(x)|^2\,dx = \frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^2\int x^2e^{-2\alpha x^2}\,dx = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\pi\alpha}{2}}\ ;$$

y

$$\int V(x)|\Psi_\alpha(x)|^2\,dx = \int V(x)(e^{-2\alpha x^2}-1)\,dx + \int V(x)\,dx\ .$$

Suponga que podemos demostrar que aquí el primer sumando tiende a 0 para $\alpha \to 0$; entonces

$$\lim_{\alpha\to 0^+} \langle \Psi_\alpha, H\Psi_\alpha\rangle = \int V(x)\,dx\ <\ 0\ ;$$

y por lo tanto hay $\alpha > 0$ tal que $\|\Psi_\alpha\|^{-2}\langle \Psi_\alpha, H\Psi_\alpha\rangle < 0$, y por ende hay un estado ligado.

Lema: Para $t \geq 0$ se tiene $1 - e^{-t} < t$.

Demostración: Sea $f(t) = t + e^{-t} - 1$; entonces $f(0) = 0$ y $f'(t) = 1 - e^{-t} \geq 0$ pues $f'(0) = 0$ y $f''(t) = e^{-t} > 0$.

Ahora,

$$|\int V(x)(e^{-2\alpha x^2}-1)\,dx| \leq \int |V(x)|(1-e^{-2\alpha x^2})\,dx \leq 2\alpha \int |V(x)|x^2\,dx$$

y el miembro derecho de la desigualdad tiende a cero para $\alpha \to 0^+$ ya que la integral es finita.

Observación: Tenga en cuenta que el límite $\lim_{\alpha\to 0^+} e^{-2\alpha x^2} = 1$ no es uniforme en $x \in \mathbb{R}$; la condición (iv) es la que nos permite concluir que $\lim_{\alpha\to 0^+} \int V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx = \int V(x)\,dx$. Si reemplazamos a (iv) por $\int |xV(x)|\,dx < \infty$; entonces podríamos usar la función de prueba $e^{-\alpha|x|}$; etc. Tenga en cuenta que (iv), aunque limita el comportamiento del potencial para $|x| \to \infty$ permite una singularidad $\mathcal{O}(x^{-2})$ en el origen. Podemos considerar muchas opciones pero: ¡No podemos prescindir de una condición de integrabilidad!
Por ejemplo: Si reemplazamos a (iv) por la condición de integrabilidad

$$\|V\|_1 := \int_{\mathbb{R}} |V(x)|\,dx < \infty\ ;$$

entonces, cualquiera sea $R > 0$ tenemos ya que $0 \leq 1 - e^{-2\alpha x^2} \leq 1$,

$$\left|\int V(x)(e^{-2\alpha x^2}-1)\,dx\right| \leq \int_{-R}^{R} |V(x)|(1-e^{-2\alpha x})dx + \int_{|x|>R} |V(x)|\,dx\ ;$$

usando la desigualdad del lema

$$\begin{aligned}\left|\int V(x)(e^{-2\alpha x^2}-1)\,dx\right| &\leq 2\alpha R^2 \int_{-R}^{R} |V(x)|\,dx + \int_{|x|>R} |V(x)|\,dx \\ &\leq 2\alpha R^2 \|V\|_1 + \int_{|x|>R} |V(x)|\,dx\ ;\end{aligned}$$

y con $R = \alpha^{-1/4}$

$$\left|\int V(x)(e^{-2\alpha x^2}-1)\,dx\right| \leq 2\sqrt{\alpha}\|V\|_1 + \int_{|x|>1/\sqrt[4]{\alpha}} |V(x)|\,dx\ .$$

Por la condición (ii), $|V(x)|$ es acotada para $|x|$ lo suficientemente grande y entonces

$$\lim_{\alpha\to 0^+} \int_{|x|>1/\sqrt[4]{\alpha}} |V(x)|\,dx = 0$$

con lo cual $\lim_{\alpha\to 0^+} \int V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx = \int V(x)\,dx$ completando la demostración.

Ahora podemos pasar a considerar el problema dado.
a) Basta que $\int_{\mathbb{R}} V(x)\,dx < 0$. Pero

$$\int_{\mathbb{R}} V(x)\,dx = V_o\sqrt{\frac{\pi}{a}}\,\frac{1}{4a}(1-4aJ)\ ;$$

ergo habrá estado ligado si $4aJ > 1$. Observe que el parámetro

$$\kappa := 4aJ$$

es adimensional.

b) Primeramente determino N de modo que $\Psi(x) := Ne^{-bx^2}$ este normalizada para $b>0$. De

$$1 = N^2\int_{\mathbb{R}} e^{-2bx^2}\,dx = N^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

deducimos que $N = (2b/\pi)^{1/4}$. Integrando por partes obtengo

$$-\langle\Psi,\Psi''\rangle = \langle\Psi',\Psi'\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\Psi'(x)|^2\,dx = N^2(-2b)^2\int_{\mathbb{R}} x^2e^{-2bx^2}\,dx = 4b^2\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{(2b)^3}} = b\ .$$

Además,

$$\langle\Psi,V\Psi\rangle = V_oN^2\int_{\mathbb{R}}\left(\frac{x^2}{2}-J\right)e^{-(a+2b)x^2}\,dx = V_oN^2\left(\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{(a+2b)^3}} - J\sqrt{\frac{\pi}{a+2b}}\right)$$

$$= V_o\sqrt{\frac{2b}{a+2b}}\left(\frac{1}{4(a+2b)}-J\right) = V_o\frac{1}{4a}\sqrt{\frac{2b}{a+2b}}\left(\frac{a}{a+2b}-\kappa\right)\ .$$

De modo que

$$\langle\Psi,H\Psi\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + V_o\frac{1}{4a}\sqrt{\frac{2b}{a+2b}}\left(\frac{a}{a+2b}-\kappa\right)\ .$$

Conviene quizás introducir el parámetro adimensional

$$\lambda := 2b/a\ \in (0,\infty)$$

y reescribir

$$\langle\Psi,H\Psi\rangle = \frac{\hbar^2\lambda a}{4m} + \frac{V_o}{4a}\sqrt{\frac{\lambda}{1+\lambda}}\left(\frac{1}{1+\lambda}-\kappa\right)\ ;$$

de donde la condición $\langle\Psi,H\Psi\rangle < 0$ es equivalente a

$$\kappa > \frac{\hbar^2a^2}{V_om}\sqrt{\lambda(1+\lambda)} + \frac{1}{1+\lambda} =: \phi(\lambda) \geq \min_{\lambda>0}\phi(\lambda)\ . \tag{1}$$

Ahora bien, ϕ es función positiva y continua de $\lambda\in(0,\infty)$ con $\lim_{\lambda\to 0}\phi(\lambda) = 1$ y $\lim_{\lambda\to\infty}\phi(\lambda) = \infty$. En particular, el mínimo de ϕ es menor o igual a 1 de donde recupero que hay estado ligado si $\kappa > 1$.
La discusión del mínimo de ϕ no es trivial. Dependiendo del valor de $\zeta := \hbar^2a^2/V_om$ (que es adimensional) el mínimo puede ser 1 (y entonces la cota de a) no se mejora) o bien menor a 1 en cuyo caso $\kappa > \min_{\lambda>0}\phi(\lambda)$ es más permisivo (i.e., mejor) que la cota de a). Un análisis más preciso (ver figura 2) muestra que hay un valor crítico $\zeta_o \approx 0{,}38$ de ζ de modo que por encima de ζ_o se tiene $\min_{\lambda>0}\phi(\lambda) = 1$, mientras que por debajo de ζ_o, $\min_{\lambda>0}\phi(\lambda) < 1$. Valga la figura 1 como ilustración.
Lo que si puedo hacer es reemplazar a ϕ por una función mayor en todo punto cuyo valor

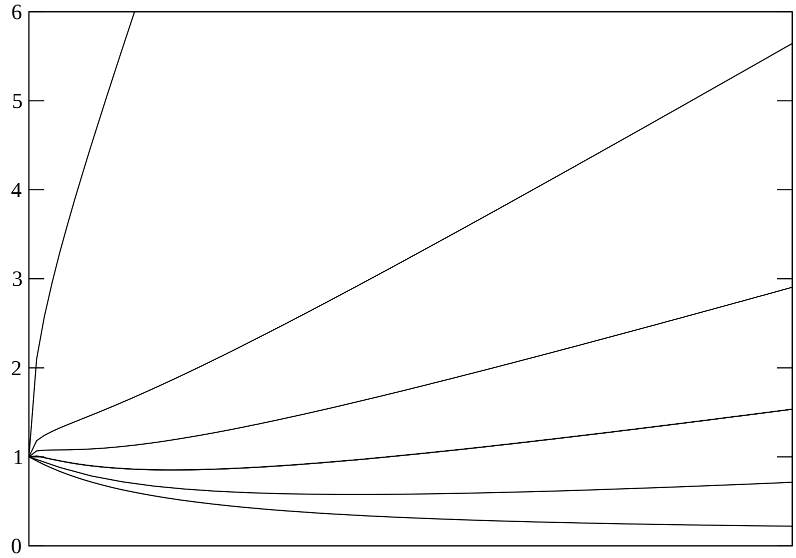

Figura 1: $\lambda \mapsto \phi(\lambda)$ para diversos valores de ζ (que decrecen horariamente).

minimal es más accesible. Por ejemplo:

$$\sigma(\lambda) = \frac{\hbar^2 a^2}{2mV_o}(2\lambda + 1) + \frac{1}{1+\lambda} \ ;$$

que satisface $\sigma(\lambda) > \phi(\lambda)$ para todo $\lambda > 0$ pues es cierto que $\lambda(\lambda{+}1) < \lambda(\lambda{+}1){+}1/4 = (\lambda{+}1/2)^2$. Entonces, si $\kappa > \text{mín}_{\lambda>0}\,\sigma(\lambda)$ a fortiori $\kappa > \text{mín}_{\lambda>0}\,\phi(\lambda)$. Veamos este nuevo problema minimal que, observando que σ es convexa (calcule la segunda derivada), se reduce a encontrar un cero de σ' (no puede haber más de uno)

$$0 = \sigma'(\lambda) = \zeta - (1+\lambda)^{-2} \iff \lambda = \frac{1}{\sqrt{\zeta}} - 1 \ .$$

Por lo tanto, si $\zeta > 1$ entonces el mínimo de σ es $\sigma(0) = 1 + (\zeta/2)$ mientras que si $\zeta < 1$, tenemos

$$\text{mín}_{\lambda>0}\,\sigma(\lambda) = 2\sqrt{\zeta} - \frac{\zeta}{2} \ .$$

Entonces, puedo afirmar que:

$$\kappa > \begin{cases} 1 & , \quad \text{si } \zeta \geq (2-\sqrt{2})^2 \\ 2\sqrt{\zeta} - \dfrac{\zeta}{2} & , \quad \text{si } \zeta < (2-\sqrt{2})^2 \end{cases} \tag{2}$$

es condición suficiente para que se tenga un estado ligado. Obtenemos asi el diagrama de la figura 2. Mi estimación para el valor crítico es $\zeta_o \approx (2-\sqrt{2})^2 \approx 0,343$ y un análisis numérico superficial (ver figura 2) muestra que esta es una excelente aproximación.

Problema 3: Considere el Hamiltoniano H del oscilador armónico de masa m y frecuencia angular ω y su estado fundamental

$$\phi_o(x) = \left(\frac{1}{x_o^2 \pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}(x/x_o)^2\right] \ , \ \ x_o := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ .$$

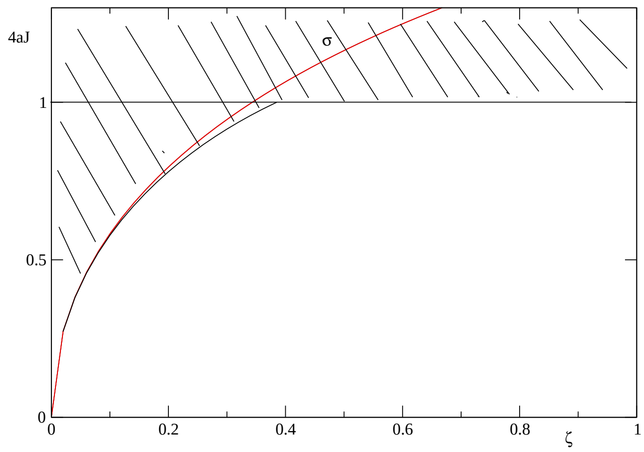

Figura 2: Gráfico de (2) y curva de existencia “exacta” con $\zeta_o \approx 0,38$. Para valores de ζ y κ en la zona rayada hay estado ligado.

Aplique el método variacional de Ritz a las funciones

$$\psi_a^+(x) := \phi_o(x+a) \ , \ \ \psi_a^-(x) := \phi_o(x-a) \ , \ a \text{ real} \ \ .$$

a) Verifique que $\psi_a^\pm$ son linealmente independientes si y solo si $a \neq 0$.
b) Determine los valores estacionarios de

$$\|c_-\psi_a^- + c_+\psi_a^+\|^{-2}\langle c_-\psi_a^- + c_+\psi_a^+, H(c_-\psi_a^- + c_+\psi_a^+)\rangle \ , \ \ c_\pm \in \mathbb{C}$$

y grafiquelos como función de $a > 0$. Determine los coeficientes respectivos.
c) Demuestre que

$$\|\psi_a^- - \psi_a^+\|^{-2}\langle \psi_a^- - \psi_a^+, H(\psi_a^- - \psi_a^+)\rangle \geq E_1$$

donde E_1 es la energía del primer estado excitado del oscilador. Determine el valor de a que minimiza esta cota.
d) Comente sobre en que medida los valores estacionarios son aproximaciones a los dos primeros estados ligados. Obtenga el valor de $a > 0$ tal que la suma de los módulos de las diferencias sea minimal.

Solución: El problema es académico pero que se le va a hacer sino hacerlo; y: ¡habrá sorpresa! Y también abreviamos a veces $N = (1/x_o^2\pi)^{1/4}$. Todas las integrales son sobre la recta real.
Para el método variacional de Ritz necesitamos las matrices $\mathbb{H}$ asociada a la energía dada por

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \langle \psi_a^+, H\psi_a^+\rangle & \langle \psi_a^+, H\psi_a^-\rangle \\ \langle \psi_a^-, H\psi_a^+\rangle & \langle \psi_a^-, H\psi_a^-\rangle \end{pmatrix}$$

y la matriz de solapación (o de Gram) $\mathbb{S}$ dada por:

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} \langle \psi_a^+, \psi_a^+\rangle & \langle \psi_a^+, \psi_a^-\rangle \\ \langle \psi_a^-, \psi_a^+\rangle & \langle \psi_a^-, \psi_a^-\rangle \end{pmatrix} \ ;$$

ambas simétricas (o hermíticas).
Ya que $\psi_a^\pm$ es una traslación unitaria de ϕ_0 que está normalizada, tenemos $\|\psi_a^\pm\| = 1$. Ahora,

$$\langle \psi_a^+, \psi_a^-\rangle = N^2 \int e^{-((x+a)/x_o)^2/2-((x-a)/x_o)^2/2}\, dx = e^{-(a/x_o)^2} \int |\phi_o(x)|^2\, dx = e^{-(a/x_o)^2} \ .$$

Por lo tanto

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} 1 & e^{-(a/x_o)^2} \\ e^{-(a/x_o)^2} & 1 \end{pmatrix} ,$$

cuya determinante es $1 - e^{-2(a/x_o)^2}$ que es mayor o igual a cero anulandose si y solo si $a = 0$. Esto contesta la pregunta a) ya que la invertibilidad de la matriz de Gram (asociada con un número denumerable de vectores en un espacio de Hilbert) es equivalente a la independencia lineal de los vectores involucrados en su construcción.

Calculamos ahora los elementos de matriz de $\mathbb{H}$. Ya que para funciones f, g de módulo cuadrado integrable que sean dos veces diferenciables con derivadas de módulo cuadrado inetgrable la integración por partes produce $-\langle f, g''\rangle = \langle f', g'\rangle$, y tenemos

$$\langle (\psi_a^{\pm})', (\psi_a^{\pm})'\rangle = \frac{N^2}{x_o^4} \int (x \pm a)^2 e^{-(x\pm a)^2/x_o^2}\, dx = \frac{N^2}{x_o^4} \int u^2 e^{-u^2/x_o^2}\, du = \frac{N^2}{x_o^4} \frac{\sqrt{\pi} x_o^3}{2} = \frac{1}{2x_o^2} \ ;$$

$$\langle (\psi_a^{+})', (\psi_a^{-})'\rangle = \frac{N^2}{x_o^4} \int (x + a)(x - a) e^{-(x+a)^2/(2x_o^2) - (x-a)^2/(2x_o^2)}\, dx$$

$$= \frac{N^2 e^{-(a/x_o)^2}}{x_o^4} \int (x^2 - a^2) e^{-(x/x_o)^2}\, dx = \frac{N^2 e^{-(a/x_o)^2}}{x_o^4} \left(\frac{\sqrt{\pi} x_o^3}{2} - a^2 \sqrt{\pi} x_o \right)$$

$$= \frac{e^{-(a/x_o)^2}}{x_o^4} \left(\frac{x_o^2}{2} - a^2 \right) \ ;$$

obtengo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \langle \psi_a^{\pm}, (\psi_a^{\pm})''\rangle = \frac{\hbar^2}{4m x_o^2} = \hbar\omega/4 \ ; \ , \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \psi_a^{+}, (\psi_a^{-})''\rangle = \frac{\hbar^2 e^{-(a/x_o)^2}}{2m x_o^4} \left(\frac{x_o^2}{2} - a^2 \right)$$

para los sumandos asociados con la energía cinética. Ahora paso a la energía potencial asociada con el potencial armónico $V(x) = kx^2/2$ con $k = m\omega^2$. Tengo

$$\langle \psi_a^{\pm}, V\psi_a^{\pm}\rangle = \frac{kN^2}{2} \int x^2 e^{-(x\pm a)^2/x_o^2}\, dx = \frac{kN^2}{2} \int (u \mp a)^2 2 e^{-u^2/x_o^2}\, du$$

$$= \frac{kN^2}{2} \int (u^2 \mp 2au + a^2) e^{-u^2/x_o^2}\, du = \frac{kN^2}{2} \left(\frac{\sqrt{\pi} x_o^3}{2} + a^2 \sqrt{\pi} x_o \right)$$

$$= \frac{k}{2} \left(\frac{x_o^2}{2} + a^2 \right) = \hbar\omega/4 + ka^2/2 \ ;$$

$$\langle \psi_a^{+}, V\psi_a^{-}\rangle = \frac{kN^2}{2} \int x^2 e^{-(x/x_o)^2 - (a/x_o)^2}\, dx = \frac{kN^2}{2} \int (u \mp a)^2 2 e^{-u^2/x_o^2}\, du$$

$$= \frac{kN^2 e^{-(a/x_o)^2}}{2} \int x^2 e^{-(x/x_o)^2}\, du = \frac{kN^2 e^{-(a/x_o)^2}}{2} \frac{\sqrt{\pi} x_o^3}{2}$$

$$= \frac{k e^{-(a/x_o)^2} x_o^2}{4} = \hbar\omega e^{-(a/x_o)^2}/4 \ .$$

De modo que introduciendo el parámetro energético (tiene esa dimensión)

$$\mu := m\omega^2 a^2 = ka^2 \ ,$$

podemos escribir –observando que $a^2/x_o^2 = \mu/(\hbar\omega)$–

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \dfrac{\hbar\omega}{2} + \dfrac{\mu}{2} & e^{-\mu/\hbar\omega} \left(\dfrac{\hbar\omega}{2} - \dfrac{\mu}{2} \right) \\ e^{-\mu/\hbar\omega} \left(\dfrac{\hbar\omega}{2} - \dfrac{\mu}{2} \right) & \dfrac{\hbar\omega}{2} + \dfrac{\mu}{2} \end{pmatrix} \ ;$$

o mejor aún

$$\mathbb{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1+\xi & e^{-\xi}(1-\xi) \\ e^{-\xi}(1-\xi) & 1+\xi \end{pmatrix} ,$$

en términos del parámetro adimensional

$$\xi := \mu/\hbar\omega \ .$$

Entonces,

$$det(\mathbb{H} - \epsilon\mathbb{S}) = \left(\frac{\hbar\omega}{2}(1+\xi) - \epsilon\right)^2 - e^{-2\xi}\left(\frac{\hbar\omega}{2}(1-\xi) - \epsilon\right)^2 \ .$$

Introduciendo el nuevo parámetro adimensional

$$\eta := 2\epsilon/(\hbar\omega) \ ,$$

los puntos estacionarios son $(\hbar\omega/2)$ veces las raices del polinomio

$$(\hbar\omega/2)^{-2}det(\mathbb{H} - (\hbar\omega/2)\eta\mathbb{S}) = (1-e^{-2\xi})\eta^2 - 2\eta(1+\xi-e^{-2\xi}(1-\xi)) + (1+\xi)^2 - e^{-2\xi}(1-\xi)^2$$

o sea:

$$\eta_\pm(\xi) = \frac{1+\xi-e^{-2\xi}(1-\xi) \pm 2\xi e^{-\xi}}{1-e^{-2\xi}} \ .$$

Esto contesta la pregunta b) módulo el gráfico que es la figura 3.

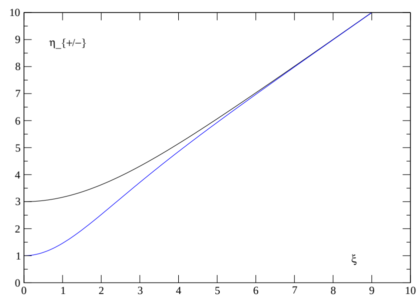

Figura 3: $\xi \mapsto \eta_\pm(\xi)$.

Claramente, $\eta_-(\xi) \leq \eta_+(\xi)$ y el Teorema Mini-Max nos dice que siempre y cuando el osc. armónico tiene a lo menos dos autovalores $E_o \leq E_1$ entonces

$$\eta_-(\xi) \geq \eta_1 = 2E_o/(\hbar\omega) \ , \ \ \eta_+(\xi) \geq \eta_2 = 2E_1/(\hbar\omega) \ .$$

Lo que contesta parcialmente la pregunta d).
Pero ahora, pasa algo extraordinario. Los valores críticos adimensionalizados $\eta_\pm$ son funciones crecientes[1] de ξ o, lo que es lo mismo, de a. Por lo tanto

$$\eta_o \leq \lim_{a\to 0^+} \eta_-(\xi) = \lim_{\xi\to 0^+} \eta_-(\xi) \ \ \& \ \ \eta_1 \leq \lim_{a\to 0^+} \eta_+(\xi) = \lim_{\xi\to 0^+} \eta_+(\xi) \ .$$

[1] Derive y verifique que la derivada es positiva.

Los límites a calcular son del tipo indeterminado 0/0. Con la regla de L'Hôpital obtengo:

$$\lim_{\xi\to 0^+} \eta_\pm(\xi) = \lim_{\xi\to 0} \frac{1 + 2e^{-2\xi}(1-\xi) + e^{-2\xi} \pm 2e^{-\xi} \mp 2\xi e^{-\xi}}{2e^{-2\xi}} = \frac{4\pm 2}{2} \ ;$$

por lo tanto

$$\eta_o \leq 1 \ , \ \ \eta_1 \leq 3$$

que –aunque no podemos saberlo– ¡son los valores exactos! Esto termina contestando d).

Falta c). Sea $(\Pi\psi)(x) := \psi(-x)$ que es un operador unitario con $\Pi^* = \Pi$. Entonces obtenemos de $\Pi\widehat{p}\Pi = -\widehat{p}$ y de $\Pi\widehat{x}\Pi = -\widehat{x}$, ya que V es par, que $\Pi H \Pi = H$. Por lo tanto el subespacio $\mathfrak{H}_- := \{f \in L^2(\mathbb{R}) : \Pi f = -f\}$ constituido por las funciones impares de L^2 es invariante para la acción de H, i.e., si $\Pi f = -f$ entonces $\Pi H f = H \Pi f = H(-f) = -Hf$. Si aplicamos el principio variacional a la restricción H_- de H a $\mathfrak{H}_-$ obtenemos:

$$\langle \psi, H\psi \rangle \geq \inf spec(H_-) \ , \quad \psi \in \mathfrak{H}_- \ , \quad \|\psi\| = 1 \ .$$

Ahora, sabemos[2] que el autovalor minimal del osc. armónico entre aquellos que tienen autovectores impares es E_1. Además,

$$(\Pi\psi_a^\pm)(x) = \psi_a^\pm(-x) = \phi_o(-x \pm a) = \phi_o(x \mp a) = \psi_a^\mp(x)$$

o sea

$$\Pi\psi_a^\pm = \psi_a^\mp \ .$$

por lo tanto,

$$\Pi(\psi_a^+ - \psi_a^-) = \psi_a^- - \psi_a^+ = -(\psi_a^+ - \psi_a^-)$$

y la función dada es impar, completando la demostración.

Ahora calculo el valor esperado de la energía –ya tenemos todo hecho

$$\|\psi_a^- - \psi_a^+\|^{-2} \langle \psi_a^- - \psi_a^+, H(\psi_a^- - \psi_a^+) \rangle = \frac{\langle \psi_a^-, H\psi_a^- \rangle + \langle \psi_a^+, H\psi_a^+ \rangle - \langle \psi_a^-, H\psi_a^+ \rangle - \langle \psi_a^+, H\psi_a^- \rangle}{\|\psi_a^-\|^2 + \|\psi_a^+\|^2 - \langle \psi_a^-, \psi_a^+ \rangle - \langle \psi_a^+, \psi_a^- \rangle}$$

$$= \hbar\omega \frac{1 + \xi - e^{-\xi}(1-\xi)}{2(1-e^{-\xi})} \ ;$$

que nuevamente es creciente en ξ y por ende (usando L'Hôpital)

$$E_1 \leq \hbar\omega \lim_{\xi \to 0} \frac{1 + \xi - e^{-\xi}(1-\xi)}{2(1-e^{-\xi})} = 3\hbar\omega/2 \ ,$$

que es el valor exacto (aunque no lo sabemos).

Observese que para $a = 0$, $\psi_a^+ = \psi_a^- = \phi_0$, y el espacio es unidimensional. Sin embargo: ¡el límite $a \to 0$ da resultados exactos! No puedo afirmar que entienda realmente porque esto es así.

Problema 4: *Teorema de Hellmann-Feynman:*
a) Pruebe que si un Hamiltoniano depende de un parametro λ y ψ_λ es un autovector normalizado

[2]Los autovalores son simples y las corresp. autofunciones son o pares o impares alternandose a medida que crece la magnitud del autovalor; el autovalor minimal es "par" (¿Porque?). Ergo el inmediatamente superior que es E_1 es "impar".

$H(\lambda)\psi_\lambda = E(\lambda)\psi_\lambda$, (asumiendo condiciones apropiadas de diferenciabilidad de $H(\cdot), E(\cdot)$ y $\psi.$), entonces

$$\frac{dE}{d\lambda}(\lambda) = \langle \psi_\lambda, (dH/d\lambda)(\lambda)\psi_\lambda \rangle \ .$$

b) Muestre que si $H = T + \lambda V$ donde el potencial V es positivo, la energía de los estados ligados si existen son funciones no-decrecientes del parámetro λ.

Solución: a) La derivada de $E(\lambda) = \langle \psi_\lambda, (dH/d\lambda)(\lambda)\psi_\lambda \rangle$ posee tres sumandos; uno es el miembro derecho de la identidad, los otros dos son $E(\lambda)[\langle (\psi_\lambda)', \psi_\lambda \rangle + \langle \psi_\lambda, (\psi_\lambda)' \rangle] = E(\lambda)(\langle \psi_\lambda, \psi_\lambda \rangle)' = 0$.
b) Es evidente.

Problema 5: Verifique que si A es un operador autoadjunto actuando en un espacio de Hilbert de dimensión finita n, y $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_k$ $(k \leq n)$ son todos sus autovalores, entonces

$$\alpha_1 \leq \text{mín}\{A_{j,j} : \ j = 1, 2, \cdots, n\} \leq \text{máx}\{A_{j,j} : \ j = 1, 2, \cdots, n\} \leq \alpha_k$$

con $A_{j,j} = \langle \psi_j, A\psi_j \rangle$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ donde $\{\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n\}$ es un conjunto maximal de vectores linealmente independientes y normalizados.

Solución: Por el Principio Variacional, i.e. $\langle \psi, A\psi \rangle \geq \alpha_1$ cualquiera sea el vector unitario ψ, obtenemos inmediatamente la primera desigualdad. La segunda es trivial.
Si considero $B := -A$ cuyo autovalor minimal es $-\alpha_k$, repitiendo lo anterior obtengo:

$$-\alpha_k \leq \text{mín}\{\langle \psi_j, B\psi_j \rangle : \ j = 1, 2, \cdots, n\} = \text{mín}\{-\langle \psi_j, A\psi_j \rangle : \ j = 1, 2, \cdots, n\}$$
$$= -\,\text{máx}\{\langle \psi_j, A\psi_j \rangle : \ j = 1, 2, \cdots, n\}$$

que es equivalente a la tercera desigualdad.

Problema 6: La matriz

$$A = \begin{pmatrix} -1 & b \\ \bar{b} & 2 \end{pmatrix}$$

es manifiestamente hermítica cualquiera sea $b \in \mathbb{C}$. Obtenga cotas superiores e inferiores para sus autovalores usando, por ejemplo el resultado del problema anterior y la desigualdad de Temple.

Solución: Lo que sigue es una posibilidad solamente y es posiblemente la más cómoda. La idea es desmitificar la desigualdad de Temple y jugar un poco con ella.

Sean α_1 y α_2 con $\alpha_1 \leq \alpha_2$ los autovalores de A (que existen y son reales). Claramente dependen de b y se tiene $\alpha_1(0) = -1$, $\alpha_2(0) = 2$. Por el problema anterior y el hecho de que $-1 < 2$,

$$\alpha_1(b) \leq -1 < 2 \leq \alpha_2(b) \ . \tag{3}$$

Recordemos

Desigualdad de Temple: Si $H = H^*$ y $E_1 := \text{ínf}\, spec(H)$ es un autovalor aislado de multiplicidad finita de H entonces ***para todo*** *E* ***con*** *$E \leq \text{ínf}\{spec(H) \setminus E_1\}$* ***y todo vector unitario*** *ψ* ***(en el dominio de*** *H* ***y de*** *H^2**)*** ***con*** *$\langle \psi, H\psi \rangle < E$, se tiene:*

$$\boxed{E_1 \geq \langle \psi, H\psi \rangle - \frac{(\Delta_\psi H)^2}{E - \langle \psi, H\psi \rangle}} \ .$$

Como mencione en mi discusión de la desigualdad de Temple, dejando ψ fijo, el miembro derecho de ella es una función monótona creciente de E que debe cumplir $E \leq \inf\{spec(H) \setminus E_1\}$; la cota mejora cuanto más cerca –pero por debajo– este E de $\inf\{spec(H) \setminus E_1\}$. En nuestra situación tenemos $\inf\{spec(H) \setminus \alpha_1\} = \alpha_2$ y, a esta altura de nuestro conocimiento que es (3), lo mejor que podemos hacer es tomar $E = 2$, con lo cual obtenemos:

$$\alpha_1(b) \geq \langle \psi, A\psi \rangle - \frac{(\Delta_\psi A)^2}{2 - \langle \psi, A\psi \rangle} \ , \ \text{ si } \psi \text{ unitario satisface } \langle \psi, A\psi \rangle < 2 \ .$$

Tomemos cualquier ψ que satisfaga la condición. Por ejemplo, con $\psi = \phi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, obtenemos

$$\alpha_1(b) \geq -1 - |b|^2/3 \ ,$$

que junto a (3) nos da

$$-1 - |b|^2/3 \leq \alpha_1 \leq -1 \ , \tag{4}$$

que no está tan mal cuando $|b|$ es chico.

Supongamos, de ahora en más, que $b \neq 0$. Tomemos $\psi_b := \frac{|b|}{\sqrt{1+|b|^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1/b \end{pmatrix}$ que está normalizado. Calculamos

$$\langle \psi_b, A\psi_b \rangle = \frac{2 - 3|b|^2}{1 + |b|^2} \ ;$$

que –por el Principio Variacional– está arriba de $\alpha_1(b)$– y es además menor que 2 los que nos permite usar a ψ_b en la desigualdad de Temple. Obtenemos (luego de hacer la gimnasia matricial necesaria) la desigualdad

$$-\frac{6 + 7|b|^2 + |b|^4}{5(1 + |b|^2)} \leq \alpha_1(b) \leq \frac{2 - 3|b|^2}{1 + |b|^2} \ . \tag{5}$$

La figura 4 muestra todas las desigualdades que tenemos hasta aquí para $\alpha_1(b)$. Se ve que hay valores de $|b|$ para los cuales podemos estar bastante conformes. ¡Se intuye que, jugando (habría que sistematizar el juego) con ψ, y con E, podemos lograr encerrar bastante bien a $\alpha_1(b)$!

Problema 7: Probar que el operador $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ es el generador de las traslaciones $(U_{\mathbf{a}}\psi)(\mathbf{r}) := \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^d$, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

Solución: Observese que $U_{\mathbf{a}}U_{\mathbf{b}} = U_{\mathbf{a}+\mathbf{b}}$ de modo que, ya que $U_{\mathbf{0}} = \mathbf{1}$, se tiene $U_{\mathbf{a}}^{-1} = U_{-\mathbf{a}}$. El manipuleo de $\langle U_{\mathbf{a}}\psi, \phi \rangle$ muestra inmediatamente que $U_{\mathbf{a}}^* = U_{-\mathbf{a}}$, de modo que $U_{\mathbf{a}}$ es unitario[3]. Consideramos el caso unidimensional $d = 1$. Allí $\mathbb{R} \ni a \mapsto U_a$ es un grupo monoparamétrico de unitarios sobre $L^2(\mathbb{R})$ y,

$$\frac{(U_a\psi)(x) - (U_0\psi)(x)}{a} = -\frac{\psi(x - a) - \psi(x)}{-a}$$

de modo que para ψ apropiada, se tiene

$$\lim_{a \to 0} \left\| \frac{U_a\psi - U_0\psi}{a} + \psi' \right\| = 0 \ .$$

Ahora, $\psi' = (i/\hbar)\widehat{p}\psi$ y nuestra convención para el generador G de un grupo monoparamétrico de operadores unitarios es $U_a = \exp\{-iaG\}$ de modo que $G = \hbar^{-1}\widehat{p}$; i.e. $U_a = e^{-ia\widehat{p}/\hbar}$.
En dimensión arbitraria tenemos

$$U_{\mathbf{a}} = U_{a_1}^{(1)} U_{a_2}^{(2)} \cdots U_{a_d}^{(d)} \ , \ \ \mathbf{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_d) \ ,$$

[3] Y $\mathbb{R}^d \ni \mathbf{a} \mapsto U_{\mathbf{a}}$ una representación unitaria del grupo de translaciones $\tau_{\mathbf{a}} : \mathbf{x} \to \mathbf{x} + \mathbf{a}$ de $\mathbb{R}^d$.

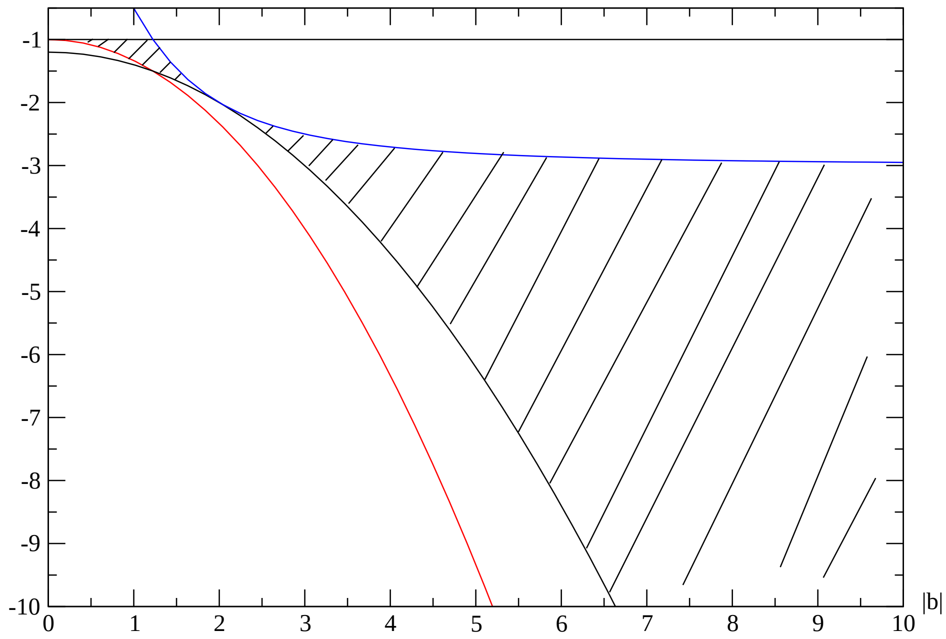

Figura 4: Las desigualdades (4) y (5) para $\alpha_1(b)$; la zona rayada contiene a este autovalor.

donde

$$(U_a^{(j)}\psi)(\mathbf{x}) := \psi(x_1, \cdots, x_{j-1}, x_j - a, x_{j+1}, \cdots, x_d) \ , \quad j = 1, 2, \cdots, d \ .$$

Claramente, por lo anterior, $U_a^{(j)} = e^{-ia\widehat{p}_j/\hbar}$ donde

$$\widehat{p}_j\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}$$

y, ya que $\widehat{p}_j\widehat{p}_k = \widehat{p}_k\widehat{p}_j$ o, lo que es lo mismo $U_a^{(j)}U_b^{(k)} = U_b^{(k)}U_a^{(j)}$, tenemos

$$U_{\mathbf{a}} = e^{-ia_1\widehat{p}_1/\hbar}e^{-ia_2\widehat{p}_2\hbar}\cdots e^{-ia_d\widehat{p}_d/\hbar} = \exp\left\{-(i/\hbar)\sum_{j=1}^{d} a_j\widehat{p}_j\right\} = e^{-i\mathbf{a}\cdot\widehat{\mathbf{p}}/\hbar} \ .$$

Problema 8: Compruebe que el operador de dilatación homogenea

$$(U_\lambda\psi)(\mathbf{x}) := \lambda^{-d/2}\psi(\mathbf{x}/\lambda) \ , \quad \lambda > 0 \ , \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$$

es unitario y verifique que

$$U_\lambda^*\widehat{\mathbf{x}}U_\lambda = \lambda\widehat{\mathbf{x}} \ , \quad U_\lambda^*\widehat{\mathbf{p}}U_\lambda = \lambda^{-1}\widehat{\mathbf{p}} \ .$$

Solución: El calificativo "homogenea" indica que cada coordenada se dilata (contrae) por el mismo factor. Podemos considerar dilataciones inhomogeneas ganando en generalidad sin costo alguno:

$$(U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}\psi)(\mathbf{x}) = \left(\prod_{j=1}^{d}\lambda_j^{-1/2}\right)\psi(x_1/\lambda_1, x_2/\lambda_2, \cdots, x_d/\lambda_d) \ , \quad \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_d > 0 \ ,$$

con

$$U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}U_{(\sigma_1,\cdots,\sigma_d)} = U_{(\lambda_1\sigma_1,\cdots,\lambda_d\sigma_d)} \ ,$$

ya que

$$(U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}U_{(\sigma_1,\cdots,\sigma_d)}\psi)(\mathbf{x}) = \left(\prod_{j=1}^{d}\lambda_j^{-1/2}\right)(U_{(\sigma_1,\cdots,\sigma_d)}\psi)(x_1/\lambda_1, x_2/\lambda_2, \cdots, x_d/\lambda_d)$$

$$= \left(\prod_{j=1}^{d}\lambda_j^{-1/2}\right)\left(\prod_{j=1}^{d}\sigma_j^{-1/2}\right)\psi(x_1/(\sigma_1\lambda_1), x_2/(\sigma_2\lambda_2), \cdots, x_d/(\sigma_d\lambda_d))$$

$$= (U_{(\lambda_1\sigma_1,\cdots,\lambda_d\sigma_d)}\psi)(\mathbf{x}) \ .$$

Por lo tanto, ya que $U_{(1,1,\cdots,1)}$ es la identidad, vemos que $U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}$ es biyectivo con inversa $U_{(1/\lambda_1,\cdots,1/\lambda_d)}$. El manipuleo de $\langle U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}\psi, \phi\rangle$ muestra inmediatamente que $U^*_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)} = U^{-1}_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}$ de modo que $U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}$ es unitario[4].
Como en el problema anterior verificamos

$$U_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)} = U_{(\lambda_1,1,\cdots,1)}U_{(1,\lambda_2,1,\cdots,1)}\cdots U_{(1,\cdots,1,\lambda_d)}$$

y reducimos todo al caso unidimensional que consideramos en lo que sigue.

Con $(U_\lambda\psi)(x) = (1/\sqrt{\lambda})\psi(x/\lambda)$ para $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, ya verificamos que

$$U_\lambda U_\sigma = U_{\lambda\sigma}$$

de donde surge que $U_\lambda^{-1} = U_{1/\lambda}$. Nos falta completar

$$\langle U_\lambda\psi, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\int_{\mathbb{R}}\overline{\psi(x/\lambda)}\phi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\int_{\mathbb{R}}\overline{\psi(y)}\phi(\lambda y)\ \lambda dy = \int_{\mathbb{R}}\overline{\psi(y)}[\sqrt{\lambda}\phi(\lambda y)]\,dy = \langle\psi, U_{1/\lambda}\phi\rangle$$

de modo que, efectivamente, $U_\lambda^* = U_{1/\lambda} = U_\lambda^{-1}$. También

$$(U_\lambda^*\widehat{x}U_\lambda\psi)(x) = \sqrt{\lambda}(\widehat{x}U_\lambda\psi)(\lambda x) = \sqrt{\lambda}\lambda x(U_\lambda\psi)(\lambda x) = \sqrt{\lambda}\lambda x\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\psi(\lambda x/\lambda) = \lambda(\widehat{x}\psi)(x) \ ,$$

de modo que $U_\lambda^*\widehat{x}U_\lambda = \lambda\widehat{x}$; y

$$(\widehat{p}U_\lambda\psi)(x) = -i\hbar\lim_{t\to 0}\frac{(U_\lambda\psi)(x+t) - (U_\lambda\psi)(x)}{t} = -i\hbar\lambda^{-1/2}\lim_{t\to 0}\frac{\psi((x+t)/\lambda) - \psi(x/\lambda)}{t}$$

$$= -i\hbar\lambda^{-3/2}\lim_{t\to 0}\frac{\psi((x+t)/\lambda) - \psi(x/\lambda)}{(t/\lambda)} = -i\hbar\lambda^{-3/2}\psi'(x/\lambda) = \frac{1}{\lambda}(U_\lambda\widehat{p}\psi)(x) \ ,$$

de modo que $U_\lambda^*\widehat{p}U_\lambda = \lambda^{-1}\widehat{p}$.

Observe que si definimos $T_t := U_{e^t}$, para $t \in \mathbb{R}$, o sea:

$$(T_t\psi)(x) = e^{-t/2}\psi(e^{-t}x) \ ,$$

tendremos

$$T_tT_s = U_{e^t}U_{e^s} = U_{e^te^s} = U_{e^{t+s}} = T_{t+s}$$

[4]Y nos entrega una representación unitaria del grupo de dilataciones inhomogeneas de $\mathbb{R}^d$ dado por $\tau_{(\lambda_1,\cdots,\lambda_d)}$: $\mathbf{x} \to (\lambda_1x_1, \lambda_2x_2, \cdots, \lambda_dx_d)$, $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_d > 0$.

de modo que $t \mapsto T_t$ es un grupo monoparamétrico de unitarios y, por lo tanto,

$$T_t = e^{-itF} \ , \ \ (F\psi)(x) := i \lim_{t \to 0} \frac{(T_t\psi)(x) - \psi(x)}{t} \ .$$

Pero entonces,

$$U_\lambda = T_{\ln(\lambda)} = \exp\{-i \ln(\lambda) F\} \ , \ \ \lambda > 0 \ .$$

El cálculo de F a partir de la definición es inmediato obteniendose

$$(F\psi)(x) = -i\frac{1}{2}\psi(x) - ix\psi'(x) = \frac{1}{\hbar}(\widehat{x}\widehat{p}\psi)(x) + \frac{-i}{2}\psi(x) = \frac{1}{2\hbar}([\widehat{x}\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x}]\psi)(x) \ ,$$

donde recordamos que $\widehat{p}\widehat{x} = \widehat{x}\widehat{p} - [\widehat{x}, \widehat{p}] = \widehat{x}\widehat{p} - i\hbar$; o sea

$$F = \frac{1}{2\hbar}[\widehat{x}\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x}]$$

y por ende

$$\boxed{U_\lambda = \exp\left\{\tfrac{-i}{2\hbar}\ln(\lambda)[\widehat{x}\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x}]\right\}} \ ;$$

lo que no se pedía pero ahí está. En el caso multidimensional e inhomogeneo obtenemos inmediatamente:

$$U^*_{(\lambda_1, \cdots, \lambda_d)}\widehat{x}U_{(\lambda_1, \cdots, \lambda_d)} = (\lambda_1\widehat{x}_1, \lambda_2\widehat{x}_2, \cdots, \lambda_d\widehat{x}_d) \ ,$$

$$U^*_{(\lambda_1, \cdots, \lambda_d)}\widehat{p}U_{(\lambda_1, \cdots, \lambda_d)} = (\lambda_1^{-1}\widehat{p}_1, \lambda_2^{-1}\widehat{p}_2, \cdots, \lambda_d^{-1}\widehat{p}_d) \ ,$$

$$U_{(\lambda_1, \cdots, \lambda_d)} = \exp\left\{\frac{-i}{2\hbar}\sum_{j=1}^{d}\ln(\lambda_j)[\widehat{x}_j\widehat{p}_j + \widehat{p}_j\widehat{x}_j]\right\} \ .$$

Las fórmulas del caso homogeneo se obtienen particularizando a $\lambda_1 = \cdots = \lambda_d = \lambda$.