Mecánica Cuántica I

Guía 7 - Mayo de 2005

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.

Problema 2: Muestre que si el Hamiltoniano unidimensional

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

cumple:

i) $\langle\Psi|H|\Psi\rangle > C$ para todo Ψ de norma 1 en el dominio de H, donde C es una constante real;

ii) $\int_{-\infty}^{\infty} |V(x)|dx < \infty$ y

iii) $\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx < 0$;

entonces H soporta al menos un estado ligado.

Sugerencia: Use el resultado variacional general con una función de prueba gaussiana $\Psi_\alpha \propto \exp(-\alpha x^2)$ para obtener una cota variacional de la energía y estudie el límite de α pequeño.

Problema 3: Considere el potencial

$$V(x) = (\frac{1}{2}x^2 - J)e^{-ax^2} \quad ; \quad a > 0$$

a) Determine (sin explicitar ninguna función de onda) una condición de existencia de estado ligado.

b) Utilice la función de prueba $\Psi_\alpha(x) \propto e^{-\alpha x^2}$ para dar una estimación del estado fundamental. Calcule la curva de existencia de estado ligado y compare con la obtenida en el punto a).

Problema 4: Considere el oscilador armónico de masa m y frecuencia angular ω y su estado fundamental

$$\phi_o(x) = \left(\frac{1}{x_0^2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right] \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Aplique el método variacional de Ritz a las funciones

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

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 grafíquelos 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.

Problema 5: *Teorema de Hellmann-Feynman:*

a) Pruebe que si un Hamiltoniano depende de un parametro λ y $|\lambda\rangle$ es un autovector normalizado $H(\lambda)\,|\lambda\rangle = E(\lambda)|\lambda\rangle$, (asumiendo condiciones apropiadas de diferenciabilidad de $H(\lambda)\,E(\lambda)$ y $|\lambda\rangle$), entonces

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \langle\lambda|\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}|\lambda\rangle$$

b) Muestre que si $H = T + \lambda V$; $\lambda > 0$ y el potencial cumple $\lim_{|\vec{x}|\to\infty} V(\vec{x}) = 0$, la energía de los estados ligados son funciones monótono decrecientes del parámetro λ.

Problema 6: Un oscilador armónico de masa m, carga q y frecuencia ω es puesto bajo la acción de un campo eléctrico constante en la dirección x positiva.

a) Tome las dos primeras autofunciones del oscilador no perturbado (campo nulo) para obtener una cota para la energía del estado fundamental y del primer estado excitado utilizando el método variacional de Ritz.

b) Vea que este problema puede resolverse en forma exacta. Calcule las energías exactas y compárelas con las obtenidas en (a)

c) Tome ahora las n $(3 \leq n \leq 6)$ primeras autofunciones del oscilador no perturbado (campo nulo) para obtener una cota para la energía del estado fundamental y los primeros estados excitados, utilizando el método variacional de Ritz. Resuelva numericamente y grafique los valores obtenidos en función de $1/n$. Estime los valores a los que convergen cuando $n \to \infty$ y compárelos con los valores exactos encontrados en el inciso (b).

Problema 7: Cálculo variacional de la energía del estado fundamental de un oscilador armónico de frecuencia ω y masa m utilizando una función de prueba racional.

Sea la función de prueba

$$\Psi_n(\alpha; x) = \frac{\mathcal{N}_n}{(\alpha + x^2)^{n/2}}$$

donde n es un número entero, $\alpha > 0$ y $\mathcal{N}_n$ una constante de normalizacion tal que $||\Psi_n(\alpha; x)|| = 1$

a) Cálcule la constante $\mathcal{N}_n$.

b) Cálcule $\langle H\rangle(n;\alpha) = \langle \Psi_n(\alpha; x)\,|H|\Psi_n(\alpha; x)\,\rangle$ para el oscilador armónico. ¿Cuales son los valores permitidos de n?

c) De una expresión α_n para el parámetro α que optimiza $\langle H\rangle(n;\alpha)$ a n fijo, y la correspondiente estimación variacional de la energía del estado fundamental. Particularice para $n = 2$, estime el error porcentual con que aproxima la energía del estado fundamental en este caso. Comente el resultado.

d) Discuta sobre el valor óptimo de n y la energía correspondiente. ¿Puede decir algo sobre la función de prueba en este caso? Verifíquelo.

Fórmulas útiles:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2k}}{(\alpha + x^2)^n} = \frac{(2k-1)!!\sqrt{\pi}\,\Gamma(n-k-1/2)}{2^k\,\Gamma(n)\,\alpha^{n-k-1/2}}$$

donde $0 \leq k < n$ enteros, $\alpha > 0$ y $\Gamma(x)$ cumple $\Gamma(m) = (m-1)!$ para m entero; $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$ y $\Gamma(x) \sim \sqrt{2\pi}\exp(-x)x^{x-1/2}$ para $x \to \infty$ (fórmula de Stirling).

$$\exp(-x) = \lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{x}{n}\right)^{-n} \quad ; \quad x > 0\,.$$

Problema 8: Considere una partícula de carga q y masa m en un campo electromagnético $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ descripto por un potencial ϕ y un vector potencial $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi \;\; ; \;\; \mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}\,.$$

a) Pruebe que el operador

$$\mathbf{V} = \frac{1}{m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)$$

asociado con la velocidad es invariante ante transformaciones de calibre.

b) Verifique que

$$[V_j, V_k] = i\frac{\hbar q}{cm^2}\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{j,k\ell}B_\ell \; ; \; [r_j, V_k] = \delta_{j,k}i(\hbar/m) \; ; \; \vec{V}\times\vec{V} = \frac{i\hbar q}{m^2 c}\vec{B}\,.$$

c) Defina la densidad de corriente que obedece la ecuación de continuidad

$$\nabla\cdot\mathbf{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$$

donde $\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ y muestre que $\mathbf{J}$ es invariante ante transformaciones de calibre.