Mecánica Cuántica I

Guía 6: Método variacional 9 de mayo de 2025

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

Problema 2: Mediante el método variacional, calcule la energía del estado fundamental de un oscilador armónico lineal mediante una función de prueba gaussiana $\Psi_\beta = A\, e^{-\beta x^2}$, determinando A mediante la condición de normalización.

Muestre que al optimizar el valor obtenido se obtiene la energía exacta del estado fundamental: ¿siempre es posible arribar a un resultado como este?

Problema 3: Utilice la función de prueba $\Psi_\beta \propto e^{-\beta x^2}$ para estimar la energía del estado fundamental de una partícula sometida a un potencial $V(x) = -\alpha\, \delta(x)$. Optimice el valor para β y compare con el resultado exacto.

Problema 4: *Teorema de Hellmann-Feynman:*

a) Pruebe que si un hamiltoniano depende de un parámetro λ y ψ_λ es una autofunción normalizada, es decir $\hat{H}(\lambda)\, \psi_\lambda = E(\lambda)\, \psi_\lambda$ (asumiendo condiciones apropiadas de diferenciabilidad de $\hat{H}(\lambda), E(\lambda)$ y ψ_λ), entonces

$$\frac{\mathrm{d}E(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} = \left\langle \psi_\lambda \middle| \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \middle| \psi_\lambda \right\rangle .$$

b) Muestre que si $\hat{H} = \hat{T} + \lambda \hat{V}$, donde el potencial es negativo, $\lambda > 0$ y $\lim_{|\boldsymbol{r}|\to\infty} V(\boldsymbol{r}) = 0$, las energías de los estados ligados son funciones monótonamente decrecientes del parámetro λ.

Problema 5: Muestre que si para el hamiltoniano unidimensional

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

se cumple:

i) $\hat{H}$ es acotado por debajo, *i.e.*, $\langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle > C$ para todo estado Ψ ($\|\Psi\| = 1$), donde $C \in \mathbb{R}$ es constante;

ii) $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0$;

iii) $\int_{\mathbb{R}} V(x)\ \mathrm{d}x < 0$;

entonces $\hat{H}$ soporta al menos un estado ligado.

Ayuda: 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 6: Considere una partícula de masa m en el potencial unidimensional

$$V(x) = \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - V_o\right) e^{-\left(x^2/x_o^2\right)} \quad ; \qquad x_o > 0\ , \quad V_o > 0\ .$$

a) Usando el resultado del problema anterior determine una condición suficiente de existencia de estado ligado.

b) Calcule el valor medio de la energía en un estado dado por la función de prueba $\Psi_\alpha(x) \propto \exp(-\alpha x^2)$.

c) Verifique que tomando $\alpha \to 0$ sobre el resultado del ítem anterior recupera la condición suficiente obtenida en el punto **a)**.

d) Observe que distintas elecciones de α pueden dar lugar a distintas condiciones suficientes para la existencia de un estado ligado. En particular, considere el valor medio de la energía de la función de prueba para el caso $\alpha = 1/x_o^2$ y deduzca de ella una condición suficiente de existencia de estado ligado. Compare con la hallada en el ítem **a)** y discuta cuál de las dos condiciones es mejor en función del valor de x_o.

Problema 7: a) Demuestre que utilizando una función de prueba ψ ortogonal a la del estado fundamental ψ_o, es posible obtener una cota para el primer estado excitado.

b) Utilice la función de prueba $\psi = Axe^{-\beta x^2}$ para estimar una cota correspondiente al primer estado excitado del oscilador armónico.

Problema 8: Considere un oscilador armónico de masa m sometido a una perturbación lineal, de modo que su energía potencial es:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + m\gamma x$$

a) Utilice la función de prueba $\psi_p = a\phi_o + b\phi_1$, donde las ϕ_i corresponden al oscilador armónico simple (centrado en $x=0$) y calcule mediante el método de Ritz una cota para la energía del estado fundamental.

b) Compare con la solución exacta del problema.

***Problema 9:** Considere el hamiltoniano $\hat{H}$ del oscilador armónico de masa m y frecuencia angular ω y su estado fundamental

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

Aplique el método variacional de Ritz a las funciones

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

a) Verifique que $\psi_a^\pm$ son linealmente independientes si y solo si $a \neq 0$.

b) Determine los valores estacionarios de

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

y grafíquelos como función de $a > 0$. Determine los coeficientes respectivos.

c) Demuestre que

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

donde E_1 es la energía del primer estado excitado del oscilador. Determine el valor de a que minimiza esta cota.

d) Comente en qué medida los valores estacionarios son aproximaciones a los dos primeros estados ligados. Obtenga en qué caso la suma de los módulos de las diferencias entre las energías y sus aproximaciones es mínima.

e) Considere los estados coherentes $|\alpha\rangle$ y $|-\alpha\rangle$ con $\alpha \in \mathbb{R}$. Usando la expansión de los estados coherentes en la base de autoestados del oscilador armónico, calcule los coeficientes de la expansión de los estados no normalizados $|\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle$. Analice el límite $\alpha \to 0$.

---

* Opcional.