

Mecánica Cuántica I

Guía 7 - Mayo de 2009

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

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

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

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

Aplique el método variacional de Ritz a las funciones

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

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

b) Determine los valores estacionarios de

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

y gráfíquelos 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 $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} V(\vec{x}) = 0$, 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 $n \rightarrow \infty$ 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 normalización tal que $\|\Psi_n(\alpha; x)\| = 1$

a) Calcule la constante \mathcal{N}_n .

b) Calcule $\langle H \rangle(n; \alpha) = \langle \Psi_n(\alpha; x) | H | \Psi_n(\alpha; x) \rangle$ 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 $x \rightarrow \infty$ (fórmula de Stirling).

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

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

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

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

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

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.