

Tema 8

Metodos aproximados

Alfonso V. Ramallo

Los problemas exactamente solubles escasean en mecanica cuantica. Por ello con frecuencia es necesario recurrir a metodos aproximados que nos permitan extraer la informacion fisicamente relevante sin necesidad de resolver exactamente el problema. En este tema estudiaremos varios de estos metodos.

1 Teoria de perturbaciones independiente del tiempo

Supongamos que tenemos un sistema cuyo hamiltoniano es de la forma:

$$H = H_0 + \lambda V , \quad (1.1)$$

donde H_0 es un hamiltoniano que sabemos resolver exactamente, λ es un parametro pequeño y V es un operador hermitico. El termino λV se denomina **perturbacion** y diremos que H_0 es el **hamiltoniano no perturbado**. Supondremos que H_0 y V son independientes del tiempo y que conocemos exactamente el espectro de H_0 . Sean E_n^0 los autovalores de H_0 y $|\psi_n^0\rangle$ sus autoestados:

$$H_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle . \quad (1.2)$$

Supondremos, de momento, que este espectro es **no degenerado**. Consideremos la ecuacion de autovalores del hamiltoniano total:

$$H |\psi_n\rangle = (H_0 + \lambda V) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle . \quad (1.3)$$

Como λ es pequeño, podemos resolver esta ecuacion de forma aproximada en serie de potencias de λ :

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots ,$$
$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (1.4)$$

Substituyendo estas expansiones en la ecuacion de autovalores (1.3), obtenemos:

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V) (|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) = \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) (|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) . \end{aligned} \quad (1.5)$$

Efectuemos los productos en esta ecuacion y agrupemos los terminos que tienen la misma potencia de λ :

$$\begin{aligned} H_0 |\psi_n^0\rangle + \lambda(H_0 |\psi_n^1\rangle + V |\psi_n^0\rangle) + \lambda^2(H_0 |\psi_n^2\rangle + V |\psi_n^1\rangle) + \dots = \\ = E_n^0 |\psi_n^0\rangle + \lambda(E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle) + \lambda^2(E_n^0 |\psi_n^2\rangle + E_n^1 |\psi_n^1\rangle + E_n^2 |\psi_n^0\rangle) + \dots \end{aligned} \quad (1.6)$$

Igualando los terminos de igual potencia de λ , obtenemos las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\lambda^0) &\implies H_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle , \\ \mathcal{O}(\lambda^1) &\implies H_0 |\psi_n^1\rangle + V |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle , \\ \mathcal{O}(\lambda^2) &\implies H_0 |\psi_n^2\rangle + V |\psi_n^1\rangle = E_n^0 |\psi_n^2\rangle + E_n^1 |\psi_n^1\rangle + E_n^2 |\psi_n^0\rangle . \end{aligned} \quad (1.7)$$

La ecuacion de orden cero en λ es la ecuacion de autovalores de H_0 , que se supone que sabemos resolver. Multipliquemos la ecuacion de orden λ^1 en (1.7) por $\langle \psi_n^0 |$ por la izquierda. Dado que $\langle \psi_n^0 | H_0 = E_n^0 \langle \psi_n^0 |$, obtenemos:

$$E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | V | \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle . \quad (1.8)$$

Suponiendo que los estados no perturbados estan normalizados ($\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$), esta ecuacion nos da:

$$\boxed{E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V | \psi_n^0 \rangle} \quad (1.9)$$

Es decir, **la correccion a primer orden de la energia es el elemento de matriz de la perturbacion entre los estados no perturbados.**

Vamos ahora a encontrar los autoestados del hamiltoniano a primer orden. Para ello multipliquemos por la izquierda la ecuacion de primer orden en (1.7) por $\langle \psi_m^0 |$ con $m \neq n$. Obtenemos:

$$E_m^0 \langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_m^0 | V | \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^1 \langle \psi_m^0 | \psi_n^0 \rangle . \quad (1.10)$$

El ultimo termino de esta ecuacion es cero si $m \neq n$. Entonces, podemos escribir:

$$(E_n^0 - E_m^0) \langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle = \langle \psi_m^0 | V | \psi_n^0 \rangle . \quad (1.11)$$

Si el espectro de H_0 no es degenerado se verifica que $E_n^0 - E_m^0 \neq 0$ y podemos despejar $\langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle$:

$$\boxed{\langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle = \frac{\langle \psi_m^0 | V | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}} \quad (m \neq n) . \quad (1.12)$$

Para obtener $|\psi_n^1\rangle$ a partir de este resultado, escribamos:

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_m |\psi_m^0\rangle \langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle = |\psi_n^0\rangle \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + \sum_{m \neq n} |\psi_m^0\rangle \langle \psi_m^0 | \psi_n^1 \rangle . \quad (1.13)$$

Veamos que podemos imponer que $\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = 0$ si exigimos que el estado total $|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle$ este normalizado a orden λ . Calculemos la norma de $|\psi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_n \rangle &= (\langle \psi_n^0 | + \lambda^* \langle \psi_n^1 |) (|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle) = \\ &= \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle + \lambda \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + \lambda^* \langle \psi_n^1 | \psi_n^0 \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Entonces, puesto que $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$, si $\lambda \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = 0$ se sigue que efectivamente $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)$. Por lo tanto, combinando (1.12) y (1.13) se puede escribir $|\psi_n^1\rangle$ como:

$$\boxed{|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | V | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^0\rangle} \quad (1.15)$$

Obtengamos ahora la segunda correccion a la energia. Para ello consideremos la ecuacion de autovalores a orden λ^2 y multipliquemosla por $\langle \psi_n^0 |$ por la izquierda:

$$E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle + \langle \psi_n^0 | V | \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^2 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle. \quad (1.16)$$

Si recordamos que $|\psi_n^0\rangle$ y $|\psi_n^1\rangle$ son ortogonales y que $|\psi_n^0\rangle$ esta normalizado, despues de simplificar esta ultima expresion, obtenemos:

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | V | \psi_n^1 \rangle. \quad (1.17)$$

Utilizando la expresion (1.15) de $|\psi_n^1\rangle$, llegamos a:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | V | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | V | \psi_m^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}, \quad (1.18)$$

que puede escribirse como:

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_n^0 | V | \psi_m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}} \quad (1.19)$$

Observese que de esta ecuacion se sigue que **la correccion a segundo orden a la energia del estado fundamental es siempre negativa**. Ello se debe a que el numerador es siempre positivo y el denominador $E_n^0 - E_m^0$ es negativo si $|\psi_n^0\rangle$ es el estado fundamental. Este hecho es especialmente relevante si la primera correccion E_n^1 se anula. Observemos tambien que las formulas anteriores son validas solo si no hay degeneracion en el espectro de H_0 . En caso contrario puede que $E_n^0 - E_m^0$ se anule para algun $m \neq n$ y tengamos ceros en los denominadores de las expresiones de $|\psi_n^1\rangle$ y E_n^2 , que dejarian por tanto de ser validas. Trataremos el caso degenerado mas adelante.

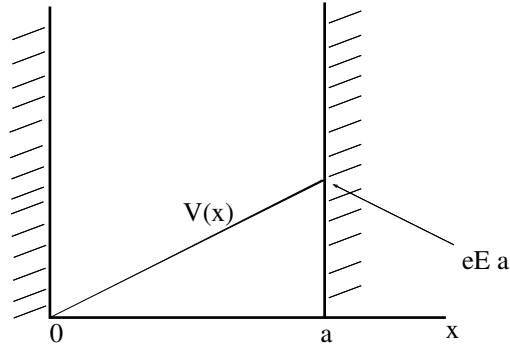


Figure 1: Potencial lineal debido a un campo electrico constante que actua sobre una partícula cargada confinada en una caja.

Ejemplo 1

Veamos un primer ejemplo sencillo. Consideremos una partícula confinada a moverse en un pozo de potencial unidimensional de anchura a , es decir una partícula en una caja de altura infinita y anchura a . Supongamos que la partícula está cargada electricamente y sometida a un campo electrico constante E . Si la carga de la partícula es e , entonces el potencial es:

$$V(x) = \begin{cases} e E x , & \text{si } 0 \leq x \leq a , \\ \infty , & \text{si } x < 0 , x > a . \end{cases} \quad (1.20)$$

Este potencial se representa graficamente en la figura 1. Escribamos el hamiltoniano total como:

$$H = H_0 + H_1 , \quad (1.21)$$

siendo, para $0 \leq x \leq a$:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} , \quad H_1 = e E x . \quad (1.22)$$

Vamos a suponer que el campo electrico E es pequeño y, en consecuencia, trataremos H_1 como una perturbacion de H_0 . Los niveles de energia y las funciones de onda no perturbada son:

$$E_n^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2 , \quad \psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \frac{\pi n x}{a} , \quad (1.23)$$

con $n = 1, 2, \dots$. La correccion a primer orden de la energia es:

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H_1 | \psi_n^0 \rangle = \int_0^a H_1 |\psi_n^0|^2 dx = \frac{2 e E}{a} I_n(a) , \quad (1.24)$$

siendo $I_n(a)$ la integral:

$$I_n(a) = \int_0^a x \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n \pi x}{a} \right) dx . \quad (1.25)$$

Para calcular la integral $I_n(a)$ hagamos el cambio de variable:

$$x \rightarrow \xi = \frac{n \pi x}{a} \implies x = \frac{a}{n \pi} \xi \implies x dx = \frac{a^2}{n^2 \pi^2} \xi d\xi . \quad (1.26)$$

Entonces, se tiene:

$$I_n(a) = \frac{a^2}{n^2 \pi^2} \int_0^{n\pi} \xi \operatorname{sen}^2 \xi d\xi = \frac{a^2}{n^2 \pi^2} \left[\frac{\xi^2}{4} - \frac{\cos(2\xi)}{8} - \frac{\xi \operatorname{sen}(2\xi)}{4} \right]_{\xi=0}^{\xi=n\pi} , \quad (1.27)$$

o, lo que es lo mismo:

$$I_n(a) = \frac{a^2}{4} . \quad (1.28)$$

Asi pues, los niveles de energia a primer orden en el campo electrico E son:

$$E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} n^2 + \frac{e E a}{2} \quad (1.29)$$

Ejemplo 2

Como segundo ejemplo consideremos un sistema con dos estados. Sean H_0 y V las matrices:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix} , \quad V = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v^* & 0 \end{pmatrix} . \quad (1.30)$$

El hamiltoniano total sera $H = H_0 + \lambda V$, cuyos elementos de matriz son:

$$H = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda v \\ \lambda v^* & E_2^0 \end{pmatrix} , \quad (1.31)$$

y los autoestados no perturbados de la energia son:

$$|1\rangle^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad |2\rangle^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (1.32)$$

que corresponden a los autovalores E_1^0 y E_2^0 de H_0 . Supongamos que $E_1^0 \neq E_2^0$, es decir que H_0 no es degenerado. La correccion a primer orden en λ de estos autovalores viene dada por los elementos de matriz diagonales de la perturbacion V en los estados $|1\rangle^0$ y $|2\rangle^0$. Claramente estos elementos de matriz son nulos, por lo

que la correccion a primer orden de los niveles de energia es cero. A segundo orden la correccion del primer nivel es:

$$E_1^2 = \frac{|{}^0\langle 1|V|2\rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0} = \frac{|v|^2}{E_1^0 - E_2^0}. \quad (1.33)$$

De forma similar, la correccion del segundo nivel es:

$$E_2^2 = \frac{|{}^0\langle 2|V|1\rangle|^2}{E_2^0 - E_1^0} = \frac{|v|^2}{E_2^0 - E_1^0}. \quad (1.34)$$

Asi pues, a orden λ^2 :

$$E_1 \approx E_1^0 + \lambda^2 \frac{|v|^2}{E_1^0 - E_2^0}, \quad E_2 \approx E_2^0 + \lambda^2 \frac{|v|^2}{E_2^0 - E_1^0}. \quad (1.35)$$

Si $E_2^0 > E_1^0$ vemos que $E_1 < E_1^0$ y $E_2 > E_2^0$. Podemos comparar este resultado con el valor exacto, que es:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(E_1^0 + E_2^0) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1^0 - E_2^0)^2 + 4\lambda^2|v|^2}. \quad (1.36)$$

Expandiendo la raiz cuadrada a segundo orden en λ , obtenemos:

$$\begin{aligned} E_{1,2} &\approx \frac{1}{2}(E_1^0 + E_2^0) \pm \frac{1}{2}(E_1^0 - E_2^0) \left[1 + \frac{2\lambda^2|v|^2}{(E_1^0 - E_2^0)^2} \right] = \\ &= E_{1,2}^0 \pm \lambda^2 \frac{|v|^2}{E_1^0 - E_2^0}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

que coincide, a este orden cuadratico en λ , con el resultado perturbativo.

2 El caso degenerado

Vamos a considerar ahora el caso en el cual los niveles de energia no perturbados estan degenerados. Supongamos que el nivel n -esimo de energia esta degenerado y que existan N autoestados $|\psi_{n_i}^0\rangle$ ($i = 1, \dots, N$) de H_0 con la misma energia E_n^0 . Claramente las formulas anteriores no funcionan en este caso. Tenemos, sin embargo, la libertad de escoger nuestro estado no perturbado como una combinacion lineal arbitraria de los estados $|\psi_{n_i}^0\rangle$. Sea $|\phi_{n_i}^0\rangle$ esta combinacion lineal, relacionada con los estados $|\psi_{n_i}^0\rangle$ en la forma:

$$|\phi_{n_i}^0\rangle = \sum_{k=1}^N c_k^{(i)} |\psi_{n_k}^0\rangle, \quad (i = 1, \dots, N), \quad (2.1)$$

siendo $c_k^{(i)}$ coeficientes a determinar. Entonces, si $H = H_0 + \lambda V$, escribimos:

$$|\psi_{n_i}\rangle = \sum_{k=1}^N c_k^{(i)} |\psi_{n_k}^0\rangle + \lambda |\psi_{n_i}^1\rangle + \dots, \quad (2.2)$$

$$E_{n_i} = E_n^0 + \lambda E_{n_i}^1 + \dots,$$

donde solo hemos escrito los terminos a primer orden. La ecuacion a resolver es $H |\psi_{n_i}\rangle = E_{n_i} |\psi_{n_i}\rangle$. Explicitamente:

$$(H_0 + \lambda V) \left(\sum_k c_k^{(i)} |\psi_{n_k}^0\rangle + \lambda |\psi_{n_i}^1\rangle \right) = (E_n^0 + \lambda E_{n_i}^1) \left(\sum_k c_k^{(i)} |\psi_{n_k}^0\rangle + \lambda |\psi_{n_i}^1\rangle \right). \quad (2.3)$$

Si conservamos solo los terminos de orden λ^0 y λ^1 esta ecuacion se convierte en:

$$\sum_k c_k^{(i)} V |\psi_{n_k}^0\rangle + H_0 |\psi_{n_i}^1\rangle = E_{n_i}^1 \sum_k c_k^{(i)} |\psi_{n_k}^0\rangle + E_n^0 |\psi_{n_i}^1\rangle. \quad (2.4)$$

Multipliquemos esta expresion por $\langle \psi_{n_j}^0 |$ por la izquierda y supongamos que los estados no perturbados son ortogonales ($\langle \psi_{n_j}^0 | \psi_{n_k}^0 \rangle = \delta_{jk}$). Al hacer esto los terminos con H_0 y E_n^0 se cancelan y obtenemos la ecuacion:

$$\boxed{\sum_{k=1}^N V_{jk} c_k^{(i)} = E_{n_i}^1 c_j^{(i)}} \quad (2.5)$$

siendo V_{jk} el elemento de matriz de la perturbacion en los estados $|\psi_{n_k}^0\rangle$ y $|\psi_{n_j}^0\rangle$:

$$\boxed{V_{jk} \equiv \langle \psi_{n_j}^0 | V | \psi_{n_k}^0 \rangle} \quad (2.6)$$

Hemos obtenido de esta forma una ecuacion para los coeficientes $c_j^{(i)}$. Supongamos que escribimos estos coeficientes en forma de vector columna:

$$c_j^{(i)} \rightarrow \begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Entonces la ecuacion obtenida puede escribirse en forma de matriz como:

$$\begin{pmatrix} V_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & V_{1N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ V_{N1} & \cdot & \cdot & \cdot & V_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N^{(i)} \end{pmatrix} = E_{n_i}^1 \begin{pmatrix} c_1^{(i)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N^{(i)} \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

que no es mas que la ecuacion de autovalores de la matriz V_{jk} . Como sabemos esta ecuacion tiene soluciones no triviales solo cuando los $E_{n_i}^1$ satisfacen la ecuacion secular:

$$\det \begin{pmatrix} V_{11} - E_{n_i}^1 & \cdot & \cdot & \cdot & V_{1N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ V_{N1} & \cdot & \cdot & \cdot & V_{NN} - E_{n_i}^1 \end{pmatrix} = 0 . \quad (2.9)$$

Asi pues, hemos demostrado que la **correccion a primer orden de los niveles de energia degenerados viene dada por los autovalores de la matriz que representa la perturbacion en el subespacio degenerado no perturbado.**

Ejemplo

Apliquemos este formalismo de perturbaciones degeneradas al sistema de dos niveles con $H = H_0 + \lambda V$, siendo ahora H_0 y V :

$$H_0 = \begin{pmatrix} E^0 & 0 \\ 0 & E^0 \end{pmatrix} , \quad V = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v^* & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.10)$$

Escribamos la ecuacion secular para V :

$$\det \begin{pmatrix} -E^1 & v \\ v^* & -E^1 \end{pmatrix} = 0 \implies (E^1)^2 - |v|^2 = 0 \implies \boxed{E^1 = \pm |v|} \quad (2.11)$$

Asi pues, los niveles de energia del sistema perturbado son:

$$\boxed{E = E^0 \pm \lambda |v|} \quad (2.12)$$

Vemos que la perturbacion rompe la degeneracion existente cuando $\lambda = 0$. Observemos que este resultado coincide exactamente con el resultado que se obtiene al substituir $E_1^0 = E_2^0 = E^0$ en la formula exacta (1.36). Ademas, los estados que diagonalizan V (y por lo tanto H) son:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} , \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ -1 \end{pmatrix} , \quad (2.13)$$

donde α es la fase del numero complejo v ($v = |v| e^{i\alpha}$). Estos estados no son una pequeña perturbacion de los estados iniciales $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, razon por la cual hemos tenido que modificar estos ultimos en nuestro estudio perturbativo.

3 Teoria de perturbaciones dependiente del tiempo

Supongamos que tenemos un hamiltoniano de la forma:

$$H(t) = H_0 + V(t) , \quad (3.1)$$

donde H_0 es un hamiltoniano independiente del tiempo cuyos autovectores y autovalores sabemos obtener y $V(t)$ es una perturbacion pequeña dependiente del tiempo. Queremos resolver la ecuacion de Schrödinger:

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle , \quad (3.2)$$

a primer orden en la perturbacion V . Como H depende de t las soluciones no pueden ser estados estacionarios. De hecho el sistema sufre una **transicion** entre un estado inicial $|\psi_i^0\rangle$ y un estado final $|\psi_n^0\rangle$. Nos proponemos obtener una expresion para la probabilidad de esta transicion. Para cualquier instante de tiempo t , el estado $|\psi(t)\rangle$ puede expandirse en autoestados de H_0 , pues estos forman una base completa. Los coeficientes de dicha expansion dependen del tiempo:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n^0\rangle , \quad (3.3)$$

donde $H_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle$. Si $V(t) = 0$ sabemos que $a_n(t) \sim e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t}$. Por ello pongamos:

$$a_n(t) = c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} , \quad (3.4)$$

es decir, escribamos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |\psi_n^0\rangle . \quad (3.5)$$

Vamos a obtener una ecuacion para los coeficientes $c_n(t)$. Calculemos el primer miembro de la ecuacion de Schrödinger:

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \sum_n \left[i \hbar \frac{dc_n}{dt} + E_n^0 c_n \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |\psi_n^0\rangle . \quad (3.6)$$

Calculemos tambien el segundo miembro:

$$\begin{aligned} H(t) |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \left[H_0 + V(t) \right] |\psi_n^0\rangle = \\ &= \sum_n \left[c_n V(t) + E_n^0 c_n \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |\psi_n^0\rangle . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Igualando ambos miembros, obtenemos:

$$i \hbar \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \frac{dc_n}{dt} |\psi_n^0\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} V(t) |\psi_n^0\rangle . \quad (3.8)$$

Multipliquemos ahora esta ecuacion por la izquierda por $\langle \psi_m^0 |$. Como $\langle \psi_m^0 | \psi_n^0 \rangle = \delta_{mn}$, obtenemos:

$$i \hbar e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} \frac{dc_m}{dt} = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \langle \psi_m^0 | V(t) | \psi_n^0 \rangle . \quad (3.9)$$

Si definimos ω_{mn} como:

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m^0 - E_n^0}{\hbar} \quad (3.10)$$

entonces (3.9) puede escribirse como:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n c_n e^{i\omega_{mn}t} \langle \psi_m^0 | V(t) | \psi_n^0 \rangle \quad (3.11)$$

A orden cero en V el segundo miembro de la ecuacion anterior (3.11) se anula y los coeficientes c_m no dependen del tiempo. Si inicialmente el sistema esta en el estado $|\psi_i^0\rangle$, entonces $c_n(t) = \delta_{ni}$ a orden cero en V . Para obtener el valor de $c_m(t)$ a primer orden en V substituyamos $c_n(t) = \delta_{ni}$ en el segundo miembro de (3.11). Obtenemos:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = e^{i\omega_{mi}t} \langle \psi_m^0 | V(t) | \psi_i^0 \rangle . \quad (3.12)$$

La solucion de esta ecuacion diferencial con la condicion inicial $c_m(t = t_0) = \delta_{mi}$ es:

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\bar{t} e^{i\omega_{mi}\bar{t}} \langle \psi_m^0 | V(\bar{t}) | \psi_i^0 \rangle \quad (3.13)$$

La probabilidad de transicion entre un estado i y un estado $n \neq i$ como funcion del tiempo es $|c_n(t)|^2$, es decir:

$$P_{i \rightarrow n}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t d\bar{t} e^{i\omega_{ni}\bar{t}} \langle \psi_n^0 | V(\bar{t}) | \psi_i^0 \rangle \right|^2 \quad (3.14)$$

Ejemplo

Supongamos que tenemos un oscilador armonico en el estado fundamental en el instante de tiempo $t_0 = -\infty$. Sobre el oscilador actua la perturbacion:

$$V(t) = -\alpha X e^{-t^2/\tau^2} , \quad (3.15)$$

siendo X el operador posicion y α y τ constantes. Sean $|n\rangle$ los autoestados del hamiltoniano no perturbado del oscilador. Si $n \neq 0$ el coeficiente $c_n(t)$ es:

$$c_n(t) = \frac{i}{\hbar} \alpha \int_{t_0}^t d\bar{t} e^{in\omega\bar{t}} e^{-\bar{t}^2/\tau^2} \langle n | X | 0 \rangle , \quad (3.16)$$

donde hemos usado que $E_n^0 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ y, por lo tanto, $\omega_{n0} = n\omega$, siendo ω la frecuencia del oscilador. Calculemos el elemento de matriz de X en (3.16). Como:

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) , \quad (3.17)$$

y, dado que $a|0\rangle = 0$ y $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$, tenemos:

$$\langle n|X|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n,1} . \quad (3.18)$$

Asi pues solo hay una transicion permitida entre el estado fundamental y el primer estado excitado. El correspondiente coeficiente es:

$$c_1(t) = \frac{i}{\hbar} \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^t d\bar{t} e^{i\omega\bar{t}} e^{-\bar{t}^2/\tau^2} . \quad (3.19)$$

Para $t = \infty$ la integral anterior es proporcional a la transformada de Fourier de una gaussiana. Como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} e^{i\omega\bar{t}} e^{-\bar{t}^2/\tau^2} = \sqrt{\pi\tau^2} e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}} . \quad (3.20)$$

Entonces:

$$c_1(\infty) = \frac{i\alpha}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \sqrt{\pi\tau^2} e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}} . \quad (3.21)$$

La probabilidad de transicion $0 \rightarrow 1$ transcurrido un tiempo infinitamente grande es $|c_1(\infty)|^2$, es decir:

$$P_{0 \rightarrow 1}(\infty) = \frac{\pi \alpha^2 \tau^2}{2 m \hbar \omega} e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}} \quad (3.22)$$

4 Perturbacion periodica

Estudiemos ahora un caso particular muy importante. Supongamos que la perturbacion tiene una dependencia periodica en el tiempo. Consideremos el caso en el cual $V(t)$ tiene la forma:

$$V(t) = T e^{-i\omega t} + T^\dagger e^{i\omega t} , \quad (4.1)$$

donde T es un operador que no depende del tiempo. Supongamos que la perturbacion empieza a actuar en el instante $t = 0$. La amplitud de transicion desde el estado i a otro $n \neq i$ es:

$$c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\bar{t} \left[\langle \psi_n^0 | T | \psi_i^0 \rangle e^{i(\omega_{ni} - \omega)\bar{t}} + \langle \psi_n^0 | T^\dagger | \psi_i^0 \rangle e^{i(\omega_{ni} + \omega)\bar{t}} \right] . \quad (4.2)$$

Definamos los elementos de matriz del operador T :

$$T_{ni} = \langle \psi_n^0 | T | \psi_i^0 \rangle . \quad (4.3)$$

Entonces, de la definicion del hermitico conjugado se sigue:

$$\langle \psi_n^0 | T^\dagger | \psi_i^0 \rangle = T_{in}^* . \quad (4.4)$$

Ademas, las integrales temporales pueden efectuarse de forma inmediata:

$$\int_0^t d\bar{t} e^{i(\omega_{ni} \pm \omega)\bar{t}} = \frac{e^{i(\omega_{ni} \pm \omega)\bar{t}}}{i(\omega_{ni} \pm \omega)} \Big|_{\bar{t}=0}^{\bar{t}=t} = \frac{e^{i(\omega_{ni} \pm \omega)t} - 1}{i(\omega_{ni} \pm \omega)}. \quad (4.5)$$

Teniendo en cuenta que:

$$e^{ix} - 1 = 2i e^{\frac{ix}{2}} \operatorname{sen} \frac{x}{2}, \quad (4.6)$$

esta ultima integral tambien puede escribirse como:

$$\int_0^t d\bar{t} e^{i(\omega_{ni} \pm \omega)\bar{t}} = e^{\frac{i}{2}(\omega_{ni} \pm \omega)t} \frac{\operatorname{sen} \frac{t}{2}(\omega_{ni} \pm \omega)}{\frac{1}{2}(\omega_{ni} \pm \omega)}. \quad (4.7)$$

Entonces, los coeficientes $c_n(t)$ son:

$$c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[T_{ni} e^{\frac{i}{2}(\omega_{ni} - \omega)t} \frac{\operatorname{sen} \frac{t}{2}(\omega_{ni} - \omega)}{\frac{1}{2}(\omega_{ni} - \omega)} + T_{in}^* e^{\frac{i}{2}(\omega_{ni} + \omega)t} \frac{\operatorname{sen} \frac{t}{2}(\omega_{ni} + \omega)}{\frac{1}{2}(\omega_{ni} + \omega)} \right] \quad (4.8)$$

La probabilidad de la transicion $i \rightarrow n$ se obtiene calculando el modulo al cuadrado del coeficiente c_n :

$$P_{i \rightarrow n} = |c_n(t)|^2. \quad (4.9)$$

Consideremos esta probabilidad como funcion de la frecuencia de la perturbacion externa ω en el limite en el cual $t \rightarrow \infty$. En la expresion (4.8) de c_n tenemos dos funciones de la forma:

$$f(\Omega) = \frac{\operatorname{sen} \Omega t}{\Omega}, \quad (4.10)$$

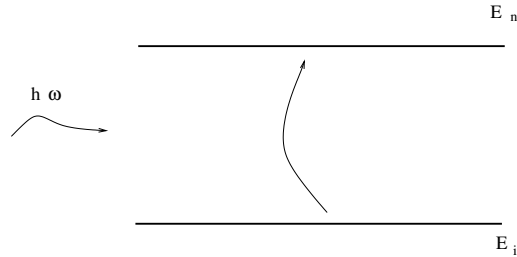
con $\Omega = (\omega_{ni} - \omega)/2$ y $\Omega = (\omega_{ni} + \omega)/2$. La funcion $f(\Omega)$ tiene un maximo principal en $\Omega = 0$ y otros maximos secundarios en $\Omega \neq 0$. A medida que $t \rightarrow \infty$ el maximo principal se hace mas grande ($f(\Omega = 0) = t$) y los maximos secundarios mas pequeños, de modo que $f(\Omega)$ esta fuertemente picada en $\Omega = 0$ (de hecho, $f(\Omega) \rightarrow \pi\delta(\Omega)$ si $t \rightarrow \infty$, tal como se demuestra mas abajo). Asi pues, para t grande los dos terminos en la expresion (4.8) de $c_n(t)$ son no nulos en torno a $\omega = \omega_{ni}$ (el primero) y $\omega = -\omega_{ni}$ (el segundo). Cuando $t \rightarrow \infty$ estas dos funciones practicamente no se superponen entre ellas, de modo que al calcular el cuadrado del modulo de la suma podemos despreciar el termino cruzado y escribir:

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{4}{\hbar^2} \left[|T_{ni}|^2 \left[\frac{\operatorname{sen} \frac{t}{2}(\omega_{ni} - \omega)}{\omega_{ni} - \omega} \right]^2 + |T_{in}|^2 \left[\frac{\operatorname{sen} \frac{t}{2}(\omega_{ni} + \omega)}{\omega_{ni} + \omega} \right]^2 \right] \quad (4.11)$$

Como funcion de ω , cuando $t \rightarrow \infty$, la expresion anterior tiene dos maximos pronunciados en $\omega = \omega_{ni}$ y $\omega = -\omega_{ni}$ y es practicamente nula para otras frecuencias. Para referirnos a esta situacion diremos que hay dos **resonancias** en $\omega = \pm\omega_{ni}$. Estas dos resonancias corresponden a procesos fisicos distintos que estudiaremos por separado.

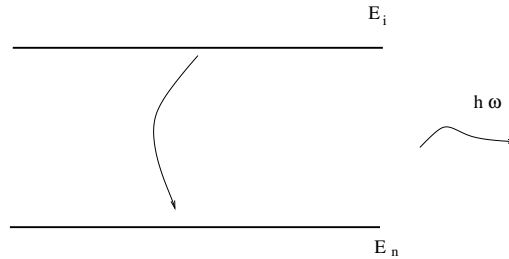
- Si $\omega = \omega_{ni}$

Esto corresponde a $\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$ o, lo que es lo mismo $E_n = E_i + \hbar\omega$. Por tanto en este proceso el sistema **absorbe** una energía $\hbar\omega$ de la perturbación y salta del nivel de energía E_i al nivel de mayor energía E_n . La relación $\Delta E = E_n - E_i = \hbar\omega$ se llama **regla de frecuencias de Bohr**.



- Si $\omega = -\omega_{ni}$

En este caso $\omega = \frac{E_i - E_n}{\hbar}$ o, equivalentemente, $E_n - E_i = -\hbar\omega$, lo que significa que el sistema **emite** una energía $\hbar\omega$ como consecuencia de la transición a un estado de energía más baja. Estos procesos se denominan procesos de **emisión estimulada** y son la base del láser.



Antes de proseguir con nuestro análisis demostremos la siguiente representación de la función- δ de Dirac:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{sen } tx}{x} = \pi \delta(x) . \quad (4.12)$$

En efecto:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^{+t} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \left. \frac{e^{ikx}}{ix} \right|_{k=-t}^{k=+t} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{e^{itx}}{ix} - \frac{e^{-itx}}{ix} \right] = \frac{1}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{sen } tx}{x} . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Ejemplo

Consideremos una partícula cargada (de carga $q = -e$) bajo la acción de una onda electromagnética clásica, cuyo potencial vector es:

$$\vec{A} = A_0 \vec{\epsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + A_0 \vec{\epsilon} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} , \quad (4.14)$$

donde $A_0 \in \mathbb{R}$ es la amplitud y $\vec{\epsilon}$ el vector de polarizacion que satisface

$$\vec{\epsilon} \cdot \vec{\epsilon} = 1, \quad \vec{k} \cdot \vec{\epsilon} = 0. \quad (4.15)$$

La ortogonalidad entre $\vec{\epsilon}$ y \vec{k} se llama **condicion de transversalidad**. El hamiltoniano de la carga acoplada a \vec{A} es:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2m c^2} \vec{A}^2, \quad (4.16)$$

donde hemos tenido en cuenta que $\vec{P} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{P}$ debido a la condicion de transversalidad $\vec{k} \cdot \vec{\epsilon} = 0$. Si el campo \vec{A} es debil, podemos despreciar el ultimo termino de H y quedarnos con el hamiltoniano de interaccion:

$$V = \frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} = \frac{e A_0}{mc} \vec{P} \cdot \vec{\epsilon} \left[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{i\omega t} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{-i\omega t} \right], \quad (4.17)$$

que coincide con nuestra expresion general (4.1) si tomamos T como el operador:

$$T = \frac{e A_0}{mc} \vec{P} \cdot \vec{\epsilon} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}. \quad (4.18)$$

Observacion

En el ejemplo anterior hemos tratado el campo \vec{A} como una perturbacion clasica. En un formalismo completamente cuantico el campo electromagnetico \vec{A} debe de considerarse como un operador. En esta formulacion cuantica la onda plana \vec{A} se interpreta como la funcion de onda de una particula (el **foton**) y, por lo tanto $\hbar\omega$ es la energia del foton. La energia absorbida o emitida por el sistema se corresponde a la absorcion o emision de un foton de energia igual a la diferencia de energias entre los niveles inicial y final.

Volvamos a la expresion general (4.11) de la probabilidad de transicion. Supongamos, por ejemplo, que la frecuencia de la perturbacion ω es proxima a ω_{ni} y, por lo tanto, solo el termino de absorcion es importante. Escribamos $P_{i \rightarrow n}$ como:

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{4}{\hbar^2} \left[\frac{\text{sen } \frac{t}{2} (\omega_{ni} - \omega)}{\omega_{ni} - \omega} \right]^2 |T_{ni}|^2. \quad (4.19)$$

Estudieemos esta probabilidad como funcion de la frecuencia para t grande. Esta dependencia es del tipo:

$$g(\Omega) = \frac{1}{\Omega^2} \text{sen}^2 \frac{\Omega t}{2}, \quad \Omega = \omega_{ni} - \omega. \quad (4.20)$$

En $\Omega = 0$ la funcion $g(\Omega)$ tiene un maximo pronunciado cuya magnitud crece con t porque $g(\Omega = 0) = t^2/4$. Asi pues, la probabilidad diverge cuando $t \rightarrow \infty$ en

la resonancia. Para dar sentido a esta divergencia, calculemos la probabilidad de transicion por unidad de tiempo, llamada **tasa de transicion**, definida como:

$$\Gamma_{i \rightarrow n} \equiv \frac{dP_{i \rightarrow n}}{dt}, \quad (t \rightarrow \infty). \quad (4.21)$$

Puesto que:

$$\frac{d}{dt} \text{sen}^2 \frac{\Omega t}{2} = 2 \text{sen} \frac{\Omega t}{2} \cos \frac{\Omega t}{2} \frac{\Omega}{2} = \frac{\Omega}{2} \text{sen} \Omega t, \quad (4.22)$$

entonces la tasa de transicion $\Gamma_{i \rightarrow n}$ viene dada por:

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{4}{\hbar^2} \frac{\omega_{ni} - \omega}{2} \frac{\text{sen}[(\omega_{ni} - \omega)t]}{(\omega_{ni} - \omega)^2} |T_{ni}|^2, \quad (4.23)$$

es decir:

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{2}{\hbar^2} \frac{\text{sen}[(\omega_{ni} - \omega)t]}{(\omega_{ni} - \omega)} |T_{ni}|^2. \quad (4.24)$$

Tomemos el limite $t \rightarrow \infty$. Segun (4.12):

$$\frac{\text{sen}[(\omega_{ni} - \omega)t]}{(\omega_{ni} - \omega)} \rightarrow \pi \delta(\omega_{ni} - \omega) = \pi \delta\left(\frac{E_n - E_i - \hbar\omega}{\hbar}\right) = \pi \hbar \delta(E_n - E_i - \hbar\omega). \quad (4.25)$$

Substituyendo este resultado en nuestra ecuacion (4.24) para la tasa de transicion, llegamos a la denominada **regla de oro de Fermi**:

$$\boxed{\Gamma_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)} \quad (4.26)$$

Observese que la presencia de la funcion- δ implica que $\Gamma_{i \rightarrow n}$ es no nula solo cuando $E_n = E_i + \hbar\omega$, que no es mas que la **ley de conservacion de la energia**: la perturbacion transfiere una energia $\hbar\omega$ al sistema. La funcion- δ desaparece si sumamos sobre todos los posibles estados finales. Esto es especialmente relevante si el conjunto de posibles estados finales es un continuo. Denotemos por $\rho(E_n)$ la densidad de estados finales con energia E_n , siendo $\rho(E_n) dE_n$ el numero de estados en un intervalo de energia entre E_n y $E_n + dE_n$. Entonces la tasa $\Gamma_{i \rightarrow n}$ debe de ser integrada en E_n despues de ser multiplicada por $\rho(E_n)$:

$$\Gamma_i = \int \Gamma_{i \rightarrow n} \rho(E_n) dE_n. \quad (4.27)$$

Substituyendo (4.26) en el segundo miembro de esta ultima ecuacion, llegamos a:

$$\Gamma_i = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_n \rho(E_n) |T_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega). \quad (4.28)$$

Haciendo la integral sobre E_n utilizando la funcion- δ , obtenemos finalmente:

$$\boxed{\Gamma_i = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ni}|^2 \rho(E_i + \hbar\omega)} \quad (4.29)$$

que es la denominada **segunda regla de oro de Fermi**.

4.1 Densidad de estados para una partícula libre

Detengámonos a estudiar la densidad de estados en el caso de que la partícula final sea una partícula libre. Para facilitar el conteo de estados consideremos una partícula en un cubo de lado L y volumen L^3 . Las funciones de onda correspondientes a un momento bien definido $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ son:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} . \quad (4.30)$$

El factor $L^{-\frac{3}{2}}$ es el adecuado para normalizar estas ondas planas en un volumen L^3 . Impongamos condiciones de contorno periódicas en el cubo:

$$\psi_{\vec{k}}(x + L, y, z) = \psi_{\vec{k}}(x, y + L, z) = \psi_{\vec{k}}(x, y, z + L) = \psi_{\vec{k}}(x, y, z) . \quad (4.31)$$

Estas condiciones implican la cuantización de las componentes del vector número de onda:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} , \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} , \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L} , \quad (n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}) . \quad (4.32)$$

De forma más condensada escribimos:

$$\boxed{k_i = \frac{2\pi n_i}{L}} \quad n_i \in \mathbb{Z} . \quad (4.33)$$

Podemos utilizar los enteros n_i para etiquetar los estados y poder hacer el conteo. El número de estados Δn_i en un intervalo Δk_i será:

$$\Delta n_i = \frac{L}{2\pi} \Delta k_i . \quad (4.34)$$

Por tanto, los estados contenidos en un elemento de volumen d^3k en tres dimensiones son:

$$dN = \frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k , \quad (4.35)$$

siendo $V = L^3$ el volumen del sistema. Puesto que $d^3k = d^3p/\hbar^3$, podemos escribir la relación anterior como:

$$dN = \frac{V}{(2\pi \hbar)^3} d^3p . \quad (4.36)$$

Tengamos en cuenta que $V = \int d^3r$ y pongamos:

$$dN = \int d\mathcal{N} , \quad (4.37)$$

siendo $d\mathcal{N}$ el número de niveles en el elemento de volumen $d^3r d^3p$. Entonces, se sigue:

$$\boxed{d\mathcal{N} = \frac{d^3r d^3p}{(2\pi \hbar)^3} = \frac{d^3r d^3p}{h^3}} \quad (4.38)$$

Notemos que $d^3r d^3p$ es el elemento de volumen infinitesimal en el espacio de fase. Podemos interpretar el resultado anterior diciendo que hay un estado cuantico por cada celda de volumen h^3 en el espacio de fase. Esto contrasta con lo que sucede en mecanica clasica, en la que cada partícula ocupa un punto (\vec{r}, \vec{p}) en el espacio de fase. Un estado cuantico ocupa al menos un volumen h^3 . Observese que esto esta de acuerdo con el principio de Heisenberg, que asegura que si una partícula esta confinada en una region de tamaño Δx , su momento esta indeterminado en una cantidad $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$.

Escribamos dN en coordenadas esfericas. Como:

$$d^3k = k^2 dk d\Omega , \quad d\Omega = \text{sen } \theta d\theta d\phi , \quad (4.39)$$

tenemos:

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega . \quad (4.40)$$

Equivalentemente:

$$dN = \frac{V}{(2\pi \hbar)^3} p^2 dp d\Omega . \quad (4.41)$$

Estudieemos ahora la distribucion en energia. En primer lugar observemos que:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad dE = \frac{p dp}{m} \quad \Longrightarrow \quad p dp = m dE . \quad (4.42)$$

Ademas, utilizando este resultado se tiene:

$$p^2 dp = m p dE = m \hbar k dE , \quad (4.43)$$

y tambien:

$$d^3k = \frac{d\Omega}{\hbar^3} m \hbar k dE = \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega dE . \quad (4.44)$$

Entonces, podemos escribir:

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega dE \equiv \rho(E) dE . \quad (4.45)$$

Es decir, la densidad de estados en energia, definida en el ultimo paso de la ecuacion anterior, es:

$$\boxed{\rho(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega} \quad (4.46)$$

Podemos expresar esta densidad en terminos de E usando que $k = p/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$. El resultado es:

$$\boxed{\rho(E) = \frac{V m}{(2\pi)^3} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^3} d\Omega} \quad (4.47)$$

Definimos ahora la densidad de estados integrada sobre el angulo solido como:

$$D(E) = \int_{\Omega} \rho(E) . \quad (4.48)$$

Como $\int d\Omega = 4\pi$, tenemos:

$$D(E) = \frac{V m}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m E} \quad (4.49)$$

Ejemplo

Consideremos un atomo de hidrogeno en su estado fundamental $1s$, al cual se le aplica un campo electrico oscilatorio dirigido a lo largo del eje z :

$$\vec{E}(t) = 2 \mathcal{E}_0 \cos \omega t \vec{k} . \quad (4.50)$$

Este campo se puede obtener a partir del potencial escalar ($\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$):

$$\phi = -2 z \mathcal{E}_0 \cos \omega t . \quad (4.51)$$

El hamiltoniano de interaccion del potencial con el electron de carga $q = -e$ es:

$$V(t) = -e\phi = 2 e \mathcal{E}_0 z \cos \omega t = e \mathcal{E}_0 z [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] , \quad (4.52)$$

que en nuestra notacion (4.1) corresponde a tener un operador:

$$T = e \mathcal{E}_0 z . \quad (4.53)$$

Utilizemos coordenadas esfericas (r, θ, ϕ) , en las cuales $z = r \cos \theta$. Entonces:

$$T = e \mathcal{E}_0 r \cos \theta . \quad (4.54)$$

Queremos estudiar el proceso en el cual el atomo se ioniza y el electron se mueve libremente. El estado inicial tiene la funcion de onda del estado $1s$:

$$\psi_i^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} , \quad (4.55)$$

siendo $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 \approx 0.53 \text{ \AA}$ el radio de Bohr. El estado final sera una onda plana de vector de onda \vec{k} y momento $\vec{p} = \hbar \vec{k}$:

$$\psi_n^{(0)} = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} . \quad (4.56)$$

El elemento de matriz a calcular es:

$$T_{ni} = \int d^3\vec{r} (\psi_n^{(0)})^* e \mathcal{E}_0 r \cos \theta \psi_i^{(0)} = \frac{e \mathcal{E}_0}{\sqrt{\pi a_0^3} L^{\frac{3}{2}}} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} r \cos \theta e^{-r/a_0} . \quad (4.57)$$

Si definimos la integral $I(\vec{k})$ como:

$$I(\vec{k}) \equiv \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} r \cos\theta e^{-r/a_0} , \quad (4.58)$$

entonces T_{ni} es:

$$T_{ni} = \frac{e \mathcal{E}_0}{\sqrt{\pi} a_0^3 L^3} I(\vec{k}) . \quad (4.59)$$

Para calcular $I(\vec{k})$ definamos la integral auxiliar:

$$J_\lambda(\vec{k}) \equiv \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\lambda r} . \quad (4.60)$$

Claramente, si derivamos $J_\lambda(\vec{k})$ con respecto a k_z obtenemos:

$$\frac{\partial J_\lambda(\vec{k})}{\partial k_z} = -i \int d^3\vec{r} z e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\lambda r} . \quad (4.61)$$

Comparemos este resultado con la definicion de $I(k)$ en (4.58) teniendo en cuenta que, en coordenadas esfericas, $z = r \cos\theta$. De esta comparacion se concluye facilmente que:

$$I(\vec{k}) = i \frac{\partial}{\partial k_z} J_{\frac{1}{a_0}}(\vec{k}) . \quad (4.62)$$

Asi pues nuestra integral $I(\vec{k})$ se puede obtener derivando $J_\lambda(\vec{k})$ con respecto a la componente z de \vec{k} . Veamos ahora que $J_\lambda(\vec{k})$ es:

$$\boxed{J_\lambda(\vec{k}) = \frac{8\pi \lambda}{(\lambda^2 + k^2)^2}} \quad (4.63)$$

Para demostrarlo escojamos nuestros ejes de modo que $\vec{k} = (0, 0, k)$. Entonces:

$$\begin{aligned} J_\lambda(\vec{k}) &= \int d^3\vec{r} e^{-i k r \cos\theta} e^{-\lambda r} = \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i k r \cos\theta} e^{-\lambda r} = \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{-\lambda r} \left[\frac{e^{-i k r \cos\theta}}{-i k r} \right]_{\cos\theta=-1}^{\cos\theta=+1} = \frac{2\pi i}{k} \int_0^\infty dr r \left[e^{-(\lambda+ik)r} - e^{-(\lambda-ik)r} \right] . \end{aligned} \quad (4.64)$$

Pero, si $\text{Re } \Lambda > 0$, se tiene:

$$\int_0^\infty dr r e^{-\Lambda r} = -\frac{\partial}{\partial \Lambda} \int_0^\infty dr e^{-\Lambda r} = -\frac{\partial}{\partial \Lambda} \left[\frac{e^{-\Lambda r}}{-\Lambda} \right]_{r=0}^{r=\infty} = -\frac{\partial}{\partial \Lambda} \left(\frac{1}{\Lambda} \right) = \frac{1}{\Lambda^2} . \quad (4.65)$$

Aplicando esta ultima ecuacion para $\Lambda = \lambda \pm i k$, tenemos:

$$J_\lambda(\vec{k}) = \frac{2\pi i}{k} \left[\frac{1}{(\lambda + ik)^2} - \frac{1}{(\lambda - ik)^2} \right] = \frac{8\pi \lambda}{(\lambda^2 + k^2)^2} , \quad (4.66)$$

que es lo que queriamos demostrar. Por otra parte, como:

$$\frac{\partial}{\partial k_z} \frac{1}{(\lambda^2 + k^2)^2} = -\frac{4k_z}{(\lambda^2 + k^2)^3}, \quad (4.67)$$

entonces, aplicando (4.62) tenemos:

$$I(\vec{k}) = i8\pi \frac{1}{a_0} \left[-\frac{4k_z}{\left(\frac{1}{a_0^2} + k^2\right)^3} \right], \quad (4.68)$$

que, despues de simplificar da:

$$\boxed{I(\vec{k}) = -\frac{32i\pi a_0^5}{(1 + a_0^2 k^2)^3} k_z} \quad (4.69)$$

Substituyendo este resultado en (4.59) obtenemos el elemento de matriz buscado:

$$\boxed{T_{ni} = -\frac{32i\pi e \mathcal{E}_0 a_0^5}{(\pi a_0^3 L^3)^{\frac{1}{2}}} \frac{k_z}{(1 + a_0^2 k^2)^3}} \quad (4.70)$$

Segun la regla de oro de Fermi la tasa de ionizacion diferencial para tener un electron eyectado en el angulo solido $d\Omega$ es:

$$d\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ni}|^2 \rho(E), \quad (4.71)$$

siendo

$$\rho(E) = \frac{\hbar L^3}{(2\pi \hbar)^3} m_e k d\Omega, \quad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}\right). \quad (4.72)$$

Entonces, teniendo en cuenta que $k_z = k \cos \theta$, podemos escribir:

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{(32)^2 \pi^2 e^2 \mathcal{E}_0^2 a_0^{10}}{\pi a_0^3 L^3} \frac{k^2 \cos^2 \theta}{(1 + a_0^2 k^2)^6} \frac{\hbar L^3}{(2\pi \hbar)^3} m_e k, \quad (4.73)$$

que, despues de simplificar, nos da la probabilidad diferencial de eyectar un electron dentro del angulo solido $d\Omega$:

$$\boxed{\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{256 m_e \mathcal{E}_0^2 e^2 a_0^7}{\pi \hbar^3} \frac{k^3}{(1 + a_0^2 k^2)^6} \cos^2 \theta} \quad (4.74)$$

En esta ecuacion k esta relacionado con la frecuencia del campo como:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}, \quad (4.75)$$

pues la energia del estado fundamental del atomo de hidrogeno es $E_i = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$ ($E_1 = |E_i|$ es la energia de ionizacion del hidrogeno). De la formula anterior se sigue que:

$$k = \frac{\sqrt{2m_e}}{\hbar} \sqrt{\hbar\omega - E_1} . \quad (4.76)$$

Vemos en (4.74) que la distribucion angular de $d\Gamma/d\Omega$ es proporcional a $\cos^2 \theta$. El maximo de la tasa de ionizacion se alcanza a una frecuencia ω tal que k satisface:

$$\frac{d}{dk} \left[\frac{k^3}{(1 + a_0^2 k^2)^6} \right] = 0 . \quad (4.77)$$

Como:

$$\frac{d}{dk} \left[\frac{k^3}{(1 + a_0^2 k^2)^6} \right] = \frac{3k^2}{(1 + a_0^2 k^2)^6} - \frac{6k^3 2k a_0^2}{(1 + a_0^2 k^2)^7} = \frac{3k^2}{(1 + a_0^2 k^2)^7} (1 - 3k^2 a_0^2) , \quad (4.78)$$

el valor $k = k_*$ que hace maxima la ionizacion es:

$$k_* = \frac{1}{\sqrt{3} a_0} = \frac{m_e e^2}{\sqrt{3} \hbar^2} . \quad (4.79)$$

La frecuencia correspondiente es:

$$\hbar\omega_* = \frac{\hbar^2 k_*^2}{2m_e} + \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{m_e^2 e^4}{3\hbar^4} + \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} . \quad (4.80)$$

Esto quiere decir que la ionizacion es maxima cuando la frecuencia vale:

$$\boxed{\omega_* = \frac{2}{3} \frac{m_e e^4}{\hbar^3}} \quad (4.81)$$

5 La aproximacion semiclassica WKB

La optica geometrica es una aproximacion a la optica ondulatoria (esta ultima se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell). Es valida para sistemas cuya escala de distancia es mucho mas grande que la longitud de onda de las ondas electromagneticas, de forma que la longitud de onda puede considerarse como muy pequena. En optica geometrica se considera que la propagacion de la luz se efectua siguiendo unas trayectorias (los rayos). En este sentido el tratamiento de la luz es muy similar al tratamiento de las particulas en mecanica clasica. En 1926 Wentzel, Kramers y Brillouin (WKB) utilizaron una formulacion similar para estudiar la ecuacion de Schrödinger. Esta aproximacion es tambien conocida como la **aproximacion semiclassica**.

Consideremos la ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo para una particula moviendose en una dimension bajo la accion de un potencial $V(x)$. Escribamos esta ecuacion en la forma:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0 , \quad (5.1)$$

siendo E la energia. Definamos el momento $p(x)$ como:

$$\boxed{p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}} \quad (5.2)$$

En terminos de $p(x)$ la ecuacion de Schrödinger toma la forma:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{p(x)}{\hbar}\right)^2 \psi(x) = 0 . \quad (5.3)$$

Parametricemos la funcion de onda $\psi(x)$ como:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} W(x)} . \quad (5.4)$$

Escribamos la ecuacion de $W(x)$. Como:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= \frac{i}{\hbar} \frac{dW}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} W(x)} , \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \left[\frac{i}{\hbar} \frac{d^2W}{dx^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 \right] e^{\frac{i}{\hbar} W(x)} , \end{aligned} \quad (5.5)$$

la ecuacion de Schrödinger es equivalente a la siguiente ecuacion diferencial de segundo orden para $W(x)$:

$$\boxed{i\hbar \frac{d^2W}{dx^2} - \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 + p^2 = 0} \quad (5.6)$$

En la aproximacion WKB la constante \hbar se considera un parametro pequeño (es una **aproximacion semiclasica**) y se expande W en potencias de \hbar :

$$W = W_0 + \hbar W_1 + \hbar^2 W_2 + \dots . \quad (5.7)$$

Substituyamos esta expansion en la ecuacion diferencial y mantengamos los terminos hasta orden \hbar . Dado que:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d^2W}{dx^2} &= i\hbar \frac{d^2W_0}{dx^2} + \dots , \\ \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 &= \left(\frac{dW_0}{dx} + \hbar \frac{dW_1}{dx} + \dots\right)^2 = \left(\frac{dW_0}{dx}\right)^2 + 2\hbar \frac{dW_1}{dx} \frac{dW_0}{dx} + \dots , \end{aligned} \quad (5.8)$$

la ecuacion de W es:

$$i\hbar \frac{d^2 W_0}{dx^2} - \left(\frac{dW_0}{dx} \right)^2 - 2\hbar \frac{dW_1}{dx} \frac{dW_0}{dx} + p^2 + \mathcal{O}(\hbar^2) = 0. \quad (5.9)$$

A orden cero en \hbar esta ecuacion es:

$$- \left(\frac{dW_0}{dx} \right)^2 + p^2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{dW_0}{dx} = \pm p(x), \quad (5.10)$$

cuya integral es:

$$\boxed{W_0(x) = \pm \int_{x_0}^x dx' p(x')} \quad (5.11)$$

La aproximacion de orden cero es valida cuando podemos despreciar el primer termino en la ecuacion de W frente al segundo, es decir cuando:

$$\hbar \left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2. \quad (5.12)$$

Expresemos esta condicion en terminos de una longitud de onda local $\lambda(x)$, definida como:

$$\boxed{\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}} \quad (5.13)$$

Usando el valor a orden cero de $\frac{dW}{dx}$ (es decir $\frac{dW}{dx} = \pm p$), tenemos:

$$\left(\frac{dW}{dx} \right)^2 \approx p^2 = \frac{(2\pi\hbar)^2}{\lambda^2}, \quad \frac{d^2 W}{dx^2} \approx \pm 2\pi\hbar \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\lambda} \right) = \mp \frac{2\pi\hbar}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{dx}. \quad (5.14)$$

Entonces, la condicion de validez de la aproximacion es:

$$\hbar \frac{2\pi\hbar}{\lambda^2} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \frac{(2\pi\hbar)^2}{\lambda^2} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 2\pi} \quad (5.15)$$

Asi pues la aproximacion es valida si el cambio de la longitud de onda con la distancia es pequeño. Representemos este resultado de otra forma usando:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{2\pi\hbar}{p^2} \frac{dp}{dx}, \quad (5.16)$$

y tengamos en cuenta que:

$$p = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad \Longrightarrow \quad \frac{dp}{dx} = -\sqrt{\frac{m}{2}} \frac{\frac{dV}{dx}}{\sqrt{E - V(x)}} = -\frac{m}{p} \frac{dV}{dx}. \quad (5.17)$$

Entonces, la desigualdad (5.15) se convierte en:

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{2\pi\hbar}{p^2} \frac{m}{p} \left| \frac{dV}{dx} \right| = \frac{m}{p^2} \lambda \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll 2\pi. \quad (5.18)$$

Equivalentemente:

$$\boxed{\lambda \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll 2\pi \frac{p^2}{m}} \quad (5.19)$$

que podemos formular diciendo que **la variación del potencial en una longitud de onda debe de ser pequeña con respecto a la energía cinética.**

Estudiemos ahora la ecuación de W a primer orden:

$$i \frac{d^2 W_0}{dx^2} = 2 \frac{dW_0}{dx} \frac{dW_1}{dx} \implies \frac{dW_1}{dx} = \frac{i}{2} \frac{\frac{d^2 W_0}{dx^2}}{\frac{dW_0}{dx}} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \log \frac{dW_0}{dx}. \quad (5.20)$$

Usando ahora el resultado (5.10) obtenido para W_0 , podemos escribir:

$$\frac{dW_1}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \log(\pm p) = i \frac{d}{dx} \log \sqrt{p}, \quad (5.21)$$

que se puede integrar como:

$$i W_1(x) = -\log \sqrt{p(x)} + \text{cte}. \quad (5.22)$$

Escribamos las soluciones para $\psi(x)$:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(W_0 + \hbar W_1)} = e^{\frac{i}{\hbar}W_0} e^{i W_1} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'}, \quad (5.23)$$

siendo C una constante. Si definimos:

$$\boxed{\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'}} \quad (5.24)$$

entonces, la solución general es:

$$\boxed{\psi(x) = C_+ \psi_+(x) + C_- \psi_-(x)} \quad (5.25)$$

siendo C_+ y C_- dos constantes de integración.

En las ecuaciones anteriores la función $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ es real si estamos en la región clásicamente permitida donde $V(x) \leq E$. Si, por el contrario, $V(x) > E$, las fórmulas siguen siendo válidas pero hay que tener en cuenta que $p(x)$ es imaginario y, por lo tanto, las exponenciales en $\psi_{\pm}(x)$ son exponenciales reales. Escribamos en este caso estas funciones como:

$$\boxed{\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'}} \quad (V(x) > E) \quad (5.26)$$

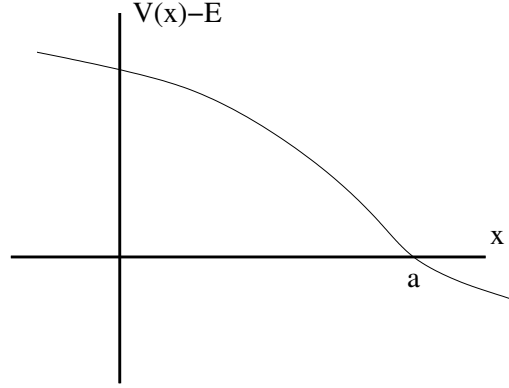


Figure 2: En un punto de retroceso $x = a$ la función $V(x) - E$ cambia de signo. En la figura $x < a$ es la región clásicamente prohibida.

La discusión anterior es relevante cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger en torno a un punto de retroceso. Supongamos que $x = a$ es uno de esos puntos y que $x < a$ sea la región clásicamente prohibida, tal como se muestra en la figura 2. En principio deberíamos tener una solución del tipo:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'} , & \text{si } x < a , \\ \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'} + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'} , & \text{si } x > a , \end{cases} \quad (5.27)$$

donde hemos escogido $x_0 = a$, y en la región prohibida clásicamente (es decir $x < a$), hemos impuesto que la función de onda decae exponencialmente cuando $x - a \rightarrow -\infty$. Normalmente deberíamos relacionar las constantes C , C_+ y C_- imponiendo condiciones de continuidad en $x = a$. Sucede en este caso que la aproximación semiclásica no es válida cerca del punto de retroceso $x = a$ porque la función $p(x)$ se anula en ese punto y, por consiguiente, $\lambda \rightarrow \infty$ cuando $x \rightarrow a$. Además el prefactor que multiplica las exponenciales diverge en $x = a$. Debemos pues estudiar separadamente la ecuación de Schrödinger en esta región próxima a $x = a$. Si desarrollamos en serie de potencias de Taylor el potencial $V(x)$ en torno a $x = a$ y nos quedamos a primer orden, tenemos:

$$V(x) \approx V(a) - \alpha(x - a) , \quad (5.28)$$

siendo:

$$\alpha = -\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=a} , \quad \alpha > 0 . \quad (5.29)$$

Por tanto, si $x \approx a$, puesto que $E \approx V(a)$, se tiene:

$$p(x) \approx \sqrt{2m\alpha(x - a)} . \quad (5.30)$$

La ecuacion de Schrödinger en esta region es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} (x - a) \psi(x) = 0 . \quad (5.31)$$

La solucion de esta ecuacion puede escribirse en terminos de las funciones de Bessel $J_\nu(x)$ de indices $\nu = \pm 1/3$. Una vez escrita la solucion de esta forma se pueden utilizar las formulas que dan el comportamiento asintotico de las funciones $J_{\pm 1/3}(x)$ para conectar las soluciones semiclassicas en las dos regiones y obtener la relacion entre C , C_+ y C_- . El resultado es el siguiente:

$$\boxed{C = \frac{C_+}{e^{-\frac{i\pi}{4}}} = \frac{C_-}{e^{\frac{i\pi}{4}}}} \quad (5.32)$$

Entonces, en la region $x > a$ la solucion es:

$$\frac{C}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{i\pi}{4}} + \frac{C}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4}} = \frac{2C}{\sqrt{p}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] . \quad (5.33)$$

En conclusion, la funcion de onda en las dos regiones es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'} , & \text{si } x < a , \\ \frac{2C}{\sqrt{p}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] , & \text{si } x > a . \end{cases} \quad (5.34)$$

5.1 Demostracion de las formulas de conexion

La singularidad que hemos observado en $x = a$ es, en realidad, fruto de nuestras aproximaciones. Por la teoria de ecuaciones diferenciales sabemos que no existe dicha singularidad en la solucion exacta del problema. Ademas, la coordenada x se puede considerar como una coordenada compleja y la solucion sigue sin ser singular. Si prolongamos x al plano complejo podemos conectar las dos regiones por medio de una trayectoria compleja que evita pasar cerca de $x = a$. Este es el procedimiento que usaremos para demostrar la formula de conexion (5.32).

Consideremos una circunferencia en el plano complejo centrada en $x = a$ y de radio $\rho > 0$. Supondremos que este radio ρ es suficientemente grande para asegurar la validez de la aproximacion WKB y suficientemente pequeño como para que el potencial $V(x)$ se pueda aproximar por una funcion lineal. La parametrizacion de x en esta circunferencia es:

$$x = a + \rho e^{i\theta} , \quad (5.35)$$

y la de $p(x)$ es:

$$p(x) = \sqrt{2m\alpha} \rho^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{\theta}{2}} . \quad (5.36)$$

Vamos a considerar la prolongacion analitica de la funcion de onda desde la region $x > a$ a la region $x < a$ a traves de una semicircunferencia de radio ρ en el plano

complejo. Esta función de onda depende de la integral de $p(x)$, que tiene un punto de ramificación en $x = a$. Definamos:

$$I(\theta) = \int_{\Gamma_\theta} dx' p(x'). \quad (5.37)$$

Esta integral se efectúa a lo largo de un camino con dos tramos:

- Tramo 1
De $x = a$ a $x = a + \rho$ sobre el eje real.
- Tramo 2
De $x = a + \rho$ a $x = a + \rho e^{i\theta}$ a lo largo de un arco de la circunferencia $|x - a| = \rho$.

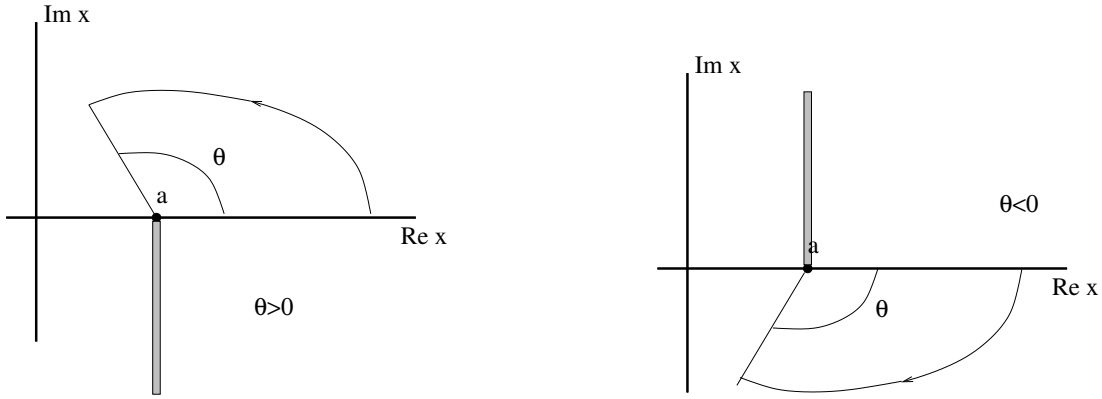


Figure 3: Representación de los dos tramos del camino que une $x = a$ con $x = a + \rho e^{i\theta}$. Para $\theta > 0$ ($\theta < 0$) el segundo tramo está contenido en el semiplano superior (inferior), tal como se muestra en la figura de la izquierda (derecha).

Si $\theta > 0$ ($\theta < 0$) el segundo tramo se efectúa en el semiplano superior (inferior). Dado el carácter bivaluado del integrando, debemos tener un corte de ramificación de forma que no intercepte el camino de integración, tal como se muestra en la figura 3.

Calculemos $I(\theta)$ separando en (5.37) las contribuciones de los dos tramos:

$$I(\theta) = \sqrt{2m\alpha} \left[\int_0^\rho d\rho' (\rho')^{\frac{1}{2}} + i\rho^{\frac{3}{2}} \int_0^\theta e^{i\frac{3\theta'}{2}} d\theta' \right], \quad (5.38)$$

donde hemos utilizado que, en el segundo tramo, $dx' = i\rho e^{i\theta'} d\theta'$. Calculando las integrales, obtenemos:

$$I(\theta) = \sqrt{2m\alpha} \left[\frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}} + i\rho^{\frac{3}{2}} \frac{e^{i\frac{3\theta}{2}} - 1}{\frac{3}{2}i} \right]. \quad (5.39)$$

Simplificando, obtenemos:

$$\boxed{I(\theta) = \frac{2\Lambda}{3} \rho^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{3\theta}{2}}} \quad \boxed{\Lambda = \sqrt{2m\alpha}} \quad (5.40)$$

En particular, para $\theta = \pi, -\pi$, esta expresion nos da:

$$\begin{aligned} I(\pi) &= \frac{2\Lambda}{3} \rho^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{3\pi}{2}} = -\frac{2i}{3} \Lambda \rho^{\frac{3}{2}}, \\ I(-\pi) &= \frac{2\Lambda}{3} \rho^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{3\pi}{2}} = \frac{2i}{3} \Lambda \rho^{\frac{3}{2}}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Los factores exponenciales que necesitamos son:

$$\begin{aligned} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} I(\pi)\right] &= \exp\left[\pm \frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}\right], \\ \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} I(-\pi)\right] &= \exp\left[\mp \frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}\right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Denotemos por $\psi_+(a - \rho)$ ($\psi_-(a - \rho)$) a las funciones de onda obtenidas por la prolongacion analitica en el punto $a - \rho$ a traves del camino $\Gamma_{+\pi}$ (respectivamente $\Gamma_{-\pi}$). Para escribir estas expresiones veamos como se transforma el factor \sqrt{p} del denominador de (5.24). A partir de (5.36), obtenemos:

$$\begin{aligned} \sqrt{p} \xrightarrow{\Gamma_{+\pi}} (2m\alpha\rho)^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\pi}{4}} &= \Lambda^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\pi}{4}}, \\ \sqrt{p} \xrightarrow{\Gamma_{-\pi}} (2m\alpha\rho)^{\frac{1}{4}} e^{-i\frac{\pi}{4}} &= \Lambda^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{4}} e^{-i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \psi_+(a - \rho) &= \frac{1}{\Lambda^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\pi}{4}}} \left[C_+ e^{\frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}} + C_- e^{-\frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}} \right], \\ \psi_-(a - \rho) &= \frac{1}{\Lambda^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{4}} e^{-i\frac{\pi}{4}}} \left[C_+ e^{-\frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}} + C_- e^{\frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}} \right]. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Por otra parte, nuestra ecuacion WKB para la funcion de onda para $x < a$ da:

$$\psi(a - \rho) = \frac{C}{\Lambda^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}}}. \quad (5.45)$$

Comparando esta ultima expresion con las de $\psi_+(a - \rho)$ y $\psi_-(a - \rho)$ vemos que en estas dos ultimas siempre hay un termino con una exponencial negativa que se puede identificar con la de $\psi(a - \rho)$ si C_+ y C_- se identifican con C como en la formula de conexion (5.32). ¿Que sucede con las otras exponenciales?. Para averiguarlo observemos que, en el proceso de continuacion analitica, las exponenciales complejas

se hace reales cuando $\theta = \pm\pi/3$ ($\theta = \pm\pi/3$ definen dos semirectas que se denominan **lineas de Stokes**). Dado que $I(\pm\pi/3) = \pm\frac{2}{3}\Lambda\rho^{\frac{3}{2}}i$, se tiene:

$$C_{\pm} \exp \left[\pm \frac{1}{\hbar} I \left(\frac{\pi}{3} \right) \right] = C_{\pm} \exp \left[\mp \frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}} \right],$$

$$C_{\pm} \exp \left[\pm \frac{1}{\hbar} I \left(-\frac{\pi}{3} \right) \right] = C_{\pm} \exp \left[\pm \frac{2\Lambda}{3\hbar} \rho^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (5.46)$$

Puesto que estamos trabajando en la aproximacion semiclasica $\hbar \rightarrow 0$, los terminos con exponencial negativa son mucho mas pequeños que aquellos con exponencial positiva y, en consecuencia, se “pierden” en el camino en esta aproximacion, de modo que solo sobreviven el termino con C_- en $\psi_+(a - \rho)$ y el termino con C_+ en $\psi_-(a - \rho)$. Observemos que estos son precisamente los terminos que tienen la exponencial negativa en $\theta = \pm\pi$ (cuya identificacion con (5.45) da lugar a la formula de conexión).

6 La condicion de Borh-Sommerfeld

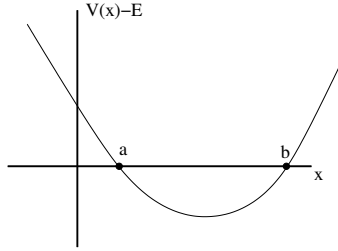


Figure 4: Un potencial con dos puntos de retroceso a y b .

Supongamos ahora que tenemos dos puntos de retroceso a y b y que queremos describir el estado ligado en la region clasicamente accesible $a \leq x \leq b$, tal como se muestra en la figura 4. Aplicando la formula de conexión entre la region prohibida $x < a$ y la region permitida:

$$\psi_a(x) = \frac{2C_a}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (6.1)$$

Por otra parte podemos conectar la funcion de onda en la region permitida con la funcion de onda en la otra region prohibida $x > b$:

$$\psi_b(x) = \frac{2C_b}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right], \quad (6.2)$$

tal como se puede probar procediendo exactamente como hicimos en el caso en el cual el punto de retroceso es $x = a$. Las funciones $\psi_a(x)$ y $\psi_b(x)$ deben de coincidir

en el intervalo $a \leq x \leq b$. Es decir, debemos de tener:

$$C_a \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] = C_b \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (6.3)$$

Escribamos la integral que aparece en el primer miembro como:

$$\int_a^x p(x') dx' = \int_a^b p(x') dx' + \int_b^x p(x') dx'. \quad (6.4)$$

Si ahora definimos las integrales

$$J \equiv \int_a^b p(x) dx, \quad K(x) = \int_x^b p(x') dx', \quad (6.5)$$

tenemos:

$$\int_a^x p(x') dx' = J - K(x). \quad (6.6)$$

Entonces, la ecuacion que se debe de satisfacer es:

$$C_a \cos \left[\frac{J}{\hbar} - \frac{K(x)}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right] = C_b \cos \left[\frac{K(x)}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (6.7)$$

Representemos en forma exponencial los dos miembros de esta ecuacion. El primer miembro es:

$$\begin{aligned} \frac{C_a}{2} \left[e^{\frac{i}{\hbar} J - \frac{i}{\hbar} K(x) - \frac{i\pi}{4}} + e^{-\frac{i}{\hbar} J + \frac{i}{\hbar} K(x) + \frac{i\pi}{4}} \right] &= \\ = \frac{C_a}{2} e^{i\left(\frac{\pi}{4} - \frac{J}{\hbar}\right)} \left[e^{\frac{i}{\hbar} K(x)} + e^{-2i\left(\frac{\pi}{4} - \frac{J}{\hbar}\right)} e^{-\frac{i}{\hbar} K(x)} \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

El segundo miembro es:

$$\frac{C_b}{2} \left[e^{\frac{i}{\hbar} K(x) - \frac{i\pi}{4}} + e^{-\frac{i}{\hbar} K(x) + \frac{i\pi}{4}} \right] = \frac{C_b}{2} e^{-\frac{i\pi}{4}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} K(x)} + e^{\frac{i\pi}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} K(x)} \right]. \quad (6.9)$$

Estas dos ultimas expresiones son iguales si:

$$\boxed{e^{-2i\left(\frac{\pi}{4} - \frac{J}{\hbar}\right)} = e^{\frac{i\pi}{2}}} \quad \boxed{\frac{C_a}{2} e^{i\left(\frac{\pi}{4} - \frac{J}{\hbar}\right)} = \frac{C_b}{2} e^{-\frac{i\pi}{4}}} \quad (6.10)$$

Observemos que la primera de estas ecuaciones es equivalente a:

$$e^{\frac{2iJ}{\hbar}} = e^{i\pi} = -1 \quad \implies \quad \frac{2iJ}{\hbar} = (2n+1)\pi i, \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (6.11)$$

Es decir:

$$\boxed{\frac{J}{\hbar} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi} \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (6.12)$$

Ademas, utilizando (6.12), la segunda igualdad en (6.10) implica:

$$C_a = C_b e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{i\frac{J}{\hbar}} = C_b e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{in\pi} e^{i\frac{\pi}{2}} \implies \boxed{C_a = C_b (-1)^n} \quad (6.13)$$

Utilizando la definicion de J , escribamos (6.12) en la forma:

$$\boxed{\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi} \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (6.14)$$

Esta condicion se denomina **condicion de cuantizacion de Borh-Sommerfeld**. Si denotamos:

$$\oint p(x) dx = 2 \int_a^b p(x) dx, \quad (6.15)$$

que es la integral a lo largo de un periodo de oscilacion $a \rightarrow b \rightarrow a$, entonces la regla de cuantizacion se puede escribir en la forma:

$$\boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = n + \frac{1}{2}} \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (6.16)$$

La regla de Borh-Sommerfeld sirve para determinar los niveles de energia de forma aproximada en el limite semiclasico. Fue postulada en los inicios de la teoria cuantica antes de tener una formulacion completa de esta. Observemos que **el entero de cuantizacion n corresponde al numero de veces que se anula la funcion de onda $\psi(x)$ en el intervalo $[a, b]$** . Para probar esto estudiemos la variacion del argumento del coseno en (6.1) cuando vamos desde $x = a$ hasta $x = b$. Inspeccionando (6.1) vemos que el angulo dentro del coseno aumenta monotonicamente al ir desde $x = a$ hasta $x = b$. En $x = a$ este angulo vale $-\pi/4$, mientras que en $x = b$ es:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi - \frac{\pi}{4} = n\pi + \frac{\pi}{4}. \quad (6.17)$$

Si $n = 0$ el angulo va desde $-\pi/4$ hasta $\pi/4$ y el coseno (y por lo tanto $\psi(x)$) no se anula. Si $n = 1$ el angulo varia desde $-\pi/4$ hasta $3\pi/4$ y $\psi(x)$ se anula una vez (en $\pi/2$). En general es facil ver que si n es el entero de cuantizacion, la funcion de onda se anula n veces. Asi pues, el entero de cuantizacion n es igual al numero de nodos (es decir ceros) de la funcion de onda semiclasica en la region permitida.

En principio la aproximacion semiclasica esta justificada cuando la longitud de onda λ es pequena o, equivalentemente, cuando $p(x)$ es grande. En ciertos potenciales, sin embargo, el resultado semiclasico para los niveles de energia coincide con el resultado exacto, tal como vamos a verificar en el caso del oscilador armonico.

Ejemplo

Consideremos un oscilador armonico unidimensional de potencial $V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$, para el cual:

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} = m\omega \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2}. \quad (6.18)$$

Los puntos de retroceso en este caso son:

$$\frac{m}{2} \omega^2 x^2 = E \quad \Longrightarrow \quad x_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} . \quad (6.19)$$

Entonces, $p(x)$ puede ponerse como:

$$p(x) = m\omega \sqrt{x_+^2 - x^2} . \quad (6.20)$$

y, la integral J es:

$$J = \int_{x_-=-x_+}^{x_+} p(x) dx = m\omega \int_{-x_+}^{x_+} \sqrt{x_+^2 - x^2} dx . \quad (6.21)$$

Sea $I(A)$ la integral:

$$I(A) \equiv \int_{-A}^{+A} \sqrt{A^2 - x^2} dx . \quad (6.22)$$

Para calcular $I(A)$ hagamos el cambio de variable $x = Ay$. Entonces:

$$I(A) = A^2 \int_{-1}^{+1} \sqrt{1 - y^2} dy = A^2 [y \sqrt{1 - y^2} + \arcsen y]_{y=-1}^{y=1} . \quad (6.23)$$

Evaluando los valores en los limites, obtenemos:

$$I(A) = \frac{A^2}{2} \pi . \quad (6.24)$$

Entonces, aplicando este resultado para calcular J , obtenemos:

$$J = \int_{x_-}^{x_+} p(x) dx = m\omega \frac{x_+^2}{2} \pi = m\omega \frac{E}{m\omega^2} \pi = \frac{\pi E}{\omega} . \quad (6.25)$$

La condicion de cuantizacion (6.14) para este caso es:

$$\frac{\pi E}{\omega} = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \Longrightarrow \quad E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) , \quad (6.26)$$

que coincide con el resultado exacto.

7 El metodo variacional

El metodo variacional es un metodo simple que permite estimar la energia del estado fundamental de un sistema. Sea E_0 dicha energia y $|0\rangle$ el correspondiente autovector del hamiltoniano:

$$H |0\rangle = E_0 |0\rangle . \quad (7.1)$$

Sea $|\psi\rangle$ un estado arbitrario del espacio de Hilbert (no necesariamente normalizado). Entonces, usando que $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$, siendo $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ y que $E_n \geq E_0$, podemos escribir:

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle, \\ \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|H|\psi\rangle = \sum_n E_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle.\end{aligned}\quad (7.2)$$

Puesto que $\langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle = |\langle\psi|n\rangle|^2 \geq 0$, tenemos:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle - E_0 \langle\psi|\psi\rangle = \sum_n (E_n - E_0) |\langle\psi|n\rangle|^2 \geq 0. \quad (7.3)$$

Es decir, para todo $|\psi\rangle$ se verifica que:

$$\boxed{E_0 \leq \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}} \quad (7.4)$$

El metodo variacional consiste en especificar un vector de prueba $|\psi(\alpha)\rangle$, dependiendo de un parametro α (o de varios parametros α_i), que escogemos para que sean lo mas proximos posibles a la forma supuesta del estado fundamental. El valor esperado del hamiltoniano en el estado $|\psi(\alpha)\rangle$ nos da una estimacion de la energia E_0 . Segun lo que acabamos de probar en (7.4):

$$\boxed{\langle H \rangle_\alpha = \frac{\langle\psi(\alpha)|H|\psi(\alpha)\rangle}{\langle\psi(\alpha)|\psi(\alpha)\rangle} \geq E_0} \quad (7.5)$$

El mejor resultado para $\langle H \rangle_\alpha$ es el que se aproxima mas a E_0 , que se obtiene para un valor $\alpha = \alpha_0$ tal que:

$$\boxed{\frac{d}{d\alpha} \langle H \rangle_\alpha \Big|_{\alpha=\alpha_0} = 0} \quad (7.6)$$

y hemos visto que

$$\boxed{E_0 \leq \frac{\langle\psi(\alpha_0)|H|\psi(\alpha_0)\rangle}{\langle\psi(\alpha_0)|\psi(\alpha_0)\rangle}} \quad (7.7)$$

que es la estimacion de la energia del estado fundamental que estabamos buscando. En la practica este metodo da buenos resultados si se eligen adecuadamente los estados de prueba, tal como se ilustra a continuacion.

Ejemplo

Consideremos el problema de una particula en una dimension bajo la accion del potencial anarmonico de la forma:

$$V(x) = \lambda x^4. \quad (7.8)$$

Consideremos las funciones de onda de prueba $\psi_\alpha = \langle x | \psi(\alpha) \rangle$ siguientes:

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}, \quad (7.9)$$

que son bastante razonables por ser gaussianas, centradas en $x = 0$ y no tener ceros (como corresponde al estado fundamental). Para estas funciones, tenemos:

$$\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\alpha x^2}. \quad (7.10)$$

Para calcular esta y otras integrales gaussianas usaremos que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\mu x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\mu}}, \quad (7.11)$$

asi como los siguientes resultados obtenidos al derivar (7.11) con respecto a μ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-\mu x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu^3}}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^4 e^{-\mu x^2} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\mu^5}}. \quad (7.12)$$

Aplicando estas formulas obtenemos:

$$\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \quad (7.13)$$

Ademas:

$$\langle \psi(\alpha) | H | \psi(\alpha) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \right] e^{-\alpha x^2}. \quad (7.14)$$

La segunda de estas integrales se calcula inmediatamente utilizando (7.12):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \lambda x^4 e^{-2\alpha x^2} = \lambda \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{(2\alpha)^5}} = \frac{3\lambda}{16\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \quad (7.15)$$

Para hacer la primera de las integrales, integremos por partes:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\alpha x^2} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d}{dx} \left(e^{-\alpha x^2} \right) \frac{d}{dx} \left(e^{-\alpha x^2} \right) = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (2\alpha)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-2\alpha x^2} = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{(2\alpha)^3}} = \frac{\hbar^2\alpha}{2m} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Entonces:

$$\langle \psi(\alpha) | H | \psi(\alpha) \rangle = \left[\frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{3\lambda}{16\alpha^2} \right] \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \quad (7.17)$$

y, teniendo en cuenta la normalizacion (7.13) de $|\psi(\alpha)\rangle$:

$$\langle H \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{3\lambda}{16 \alpha^2} . \quad (7.18)$$

Calculemos el minimo de $\langle H \rangle_\alpha$:

$$\frac{d}{d\alpha} \langle H \rangle_\alpha \Big|_{\alpha=\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{3\lambda}{8 \alpha_0^3} = 0 , \quad (7.19)$$

que da el siguiente valor de α_0 :

$$\alpha_0 = \left(\frac{3m\lambda}{4\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} . \quad (7.20)$$

Entonces:

$$\langle H \rangle_{\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3m\lambda}{4\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{3\lambda}{16} \left(\frac{4\hbar^2}{3m\lambda} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{3}{8} 2^{\frac{1}{3}} 3^{\frac{1}{3}} \hbar^{\frac{4}{3}} m^{-\frac{2}{3}} \lambda^{\frac{1}{3}} , \quad (7.21)$$

y nuestra estimacion variacional de E_0 es pues:

$$E_0 \leq \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} = 0.681 \left(\frac{\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} . \quad (7.22)$$

Mediante calculo numerico se puede resolver la ecuacion de Schrödinger para este problema con gran precision y se encuentra que:

$$E_0 = 0.668 \left(\frac{\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} , \quad (7.23)$$

que es bastante proximo al valor que hemos obtenido mediante el metodo variacional.