

Universidad de Sonora

División de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

B. CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
R.T644
100/47

El método variacional aplicado a la partícula en un campo uniforme



Tesis que para obtener el título de
Licenciado en Física
Presenta

Manuel Atienzo De La Cruz

Abril de 2003

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

573

A mis padres
A mi maestros:
Antonio Jáuregui
Angelina Uribe
A mis amigos

Contenido

Introducción	3
1 El rebotador cuántico	5
1.1 Representación integral de los estados estacionarios	5
1.2 Reducción a la ecuación de Airy	7
1.3 Solución general de la ecuación de Airy	9
1.4 Función de Airy	11
1.5 Eigenfunciones y espectro de la energía	16
1.6 Normalización	17
1.7 Valor esperado de y	20
2 El método variacional	25
2.1 El método variacional tradicional	25
2.1.1 Oscilador armónico	28
2.1.2 Átomo de hidrógeno	33
2.2 Método variacional generalizado	35
2.3 Cota inferior al estado base	38
2.3.1 Oscilador armónico	40
2.3.2 Cota inferior a la energía del estado base del oscilador .	42
2.3.3 Átomo de hidrógeno	47

3	Aplicación del método variacional al rebotador cuántico	50
3.1	Función de prueba tipo exponencial	50
3.2	Función de prueba tipo gaussiana	54
3.3	Función de prueba tipo lorentziana	58
4	Conclusiones	64
A	Reducción de la ecuación de Airy a una ecuación de Bessel	66
B	Cálculo de ceros de la función de Airy	69
C	Cálculo de la integral $I_{m,n}(\beta)$	72
	Bibliografía	73

Introducción

Los libros introductorios de mecánica cuántica generalmente incluyen tratamientos con la ecuación de Schrödinger para potenciales constantes como pozos finitos e infinitos, pozos dobles y el potencial de la familia del oscilador armónico. El caso intermedio de un potencial lineal surge del estudio del problema de una partícula en el campo uniforme. Este problema es una buena ilustración de como las condiciones en la frontera determinan las eigenfunciones y eigenvalores permitidos a partir de la solución general a la ecuación diferencial de segundo orden.

Gibbs [1] llamó a este problema rebotador cuántico debido a su semejanza con el problema de una partícula rebotando elásticamente sobre una superficie en el campo gravitacional uniforme, la partícula dentro del campo uniforme rebota contra una superficie colocada en $y = 0$ y, debido a la forma del potencial, no puede penetrar la superficie. Este problema ha despertado mucho interés en el transcurso de los años debido a su naturaleza pedagógica [2-8]. Además, debido a los últimos desarrollos de las técnicas para enfriar y manipular átomos con alta precisión ha sido posible realizar experimentalmente el rebotador cuántico [9].

En la primera parte de este trabajo construimos los estados estacionarios del rebotador cuántico. Al problema le damos un tratamiento similar al que se le da a un problema típico, empezando con la obtención de la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, siguiendo con el cálculo del espectro de energía, la constante de normalización y, en este caso particular, el valor esperado de la posición. Estos cálculos se presentan en el primer capítulo. Como el potencial del rebotador cuántico es lineal, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es más fácil de resolver en la representación del momento y pasar luego a la representación de las coordenadas; para lograr esto último realizamos un cambio de variable que nos lleva de la ecuación de Schrödinger a la ecuación de Airy, la cual resolvemos usando el método de solución en serie de potencias. Al comparar ambas soluciones obtenemos las eigenfunciones en términos de una serie infinita llamada función de Airy, la cual tiene la característica de que sus ceros

son todos negativos. Posteriormente procedemos a calcular el espectro de energía el cual, debido a la condición en la frontera, nos da los eigenvalores de la energía proporcionales a los ceros de la función de Airy. Como el sistema presenta sólo estados ligados, se requiere que las eigenfunciones caigan a cero al infinito, esto nos lleva a que la función de Airy sea una función integrable y procedemos a normalizarla, como un indicador de que dicha normalización es correcta calculamos el valor esperado de la posición el cual resulta idéntico al valor clásico.

Debido a que muchos problemas en la mecánica cuántica no pueden ser resueltos exactamente, se han construido otros métodos que nos proporcionan resultados que se aproximan al valor exacto, uno de estos métodos es el método variacional o de Ritz, con el cual obtenemos una cota superior a la energía del estado base a partir de una familia de funciones de prueba dependientes de uno o más parámetros. En el segundo capítulo revisamos el método variacional y lo aplicamos al cálculo del estado base del oscilador armónico y del átomo de hidrógeno. Lo peculiar del método es que no cuenta con un criterio para determinar la exactitud del resultado obtenido en caso de que no se conociera el valor exacto, por lo que en este segundo capítulo construimos una variante al método variacional el cual nos otorga una cota inferior. Debido a que es una generalización del método de Ritz, le hemos llamado método variacional generalizado. Así, con el método de Ritz y con esta variante, podemos acotar por arriba y por abajo la energía del estado base y podemos ver qué tan buena es la aproximación. En el caso de que las dos cotas obtenidas, la inferior y la superior, coincidan en un mismo punto, podemos asegurar que para ese valor del parámetro la función de prueba coincide con la función de onda exacta.

En el tercer capítulo aplicamos el método variacional generalizado al problema de la partícula en un campo uniforme, usamos tres familias de funciones de prueba dependientes de un parámetro, ninguna de las cuales contiene a la solución exacta, y con las cuales calculamos las cotas superior e inferior para la energía del estado base y comparamos con el resultado exacto obtenido en el primer capítulo.

Finalmente, en el capítulo de conclusiones resumimos los principales resultados de este trabajo.

1. El rebotador cuántico

En este capítulo nos proponemos encontrar los estados mecánico-cuánticos de un sistema formado por una partícula que rebota perfectamente sobre una superficie colocada en $y = 0$ bajo la influencia de un campo uniforme \mathcal{E} , con $\mathcal{E} > 0$. Esto es, el potencial al cual está sometida la partícula es de la forma

$$V(y) = \begin{cases} \mathcal{E}y & y > 0 \\ \infty & y \leq 0 \end{cases} \quad (1.1)$$

Este sistema se conoce como rebotador cuántico porque clásicamente corresponde a una partícula rebotando elásticamente sobre una superficie horizontal bajo la acción del campo gravitacional. En la Figura 1.1 graficamos¹ este potencial y la forma general que tiene la función de onda para una energía E , la función de onda oscila en la región donde $E > V(y)$, pero cae a cero exponencialmente cuando $E < V(y)$.

1.1 Representación integral de los estados estacionarios

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el rebotador cuántico es:

$$\hat{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.2)$$

donde $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mathcal{E}y$ es el operador hamiltoniano. La ecuación deberá ser resuelta con la condición en la frontera:

$$\Psi(0, t) = 0. \quad (1.3)$$

La solución más general a la ecuación (1.2) se puede escribir como el desarrollo:

$$\Psi(y, t) = \sum_E c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_E(y), \quad (1.4)$$

¹Todas las figuras de este trabajo fueron realizadas con el programa Mathematica versión 3.0

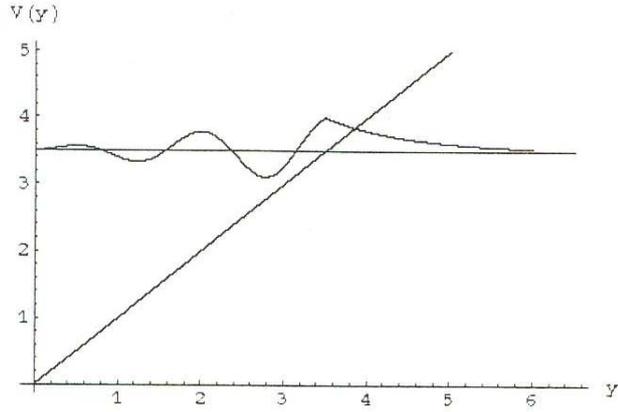


Figura 1.1: Potencial de un campo uniforme y comportamiento típico de la función de onda para una energía E .

donde los coeficientes c_E son determinados a partir de la condición inicial $\Psi(y, 0)$ y las funciones $\psi_E(y)$ representan los estados estacionarios del sistema. Los estados estacionarios del sistema son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$\hat{H} \psi_E = E\psi_E, \tag{1.5}$$

y, siendo estados ligados, las eigenfunciones $\psi_E(y)$ caen a cero al infinito y en el origen satisfacen la condición en la frontera

$$\psi_E(0) = 0. \tag{1.6}$$

Para encontrar los estados estacionarios hay que resolver la ecuación (1.5) y aplicar la condición en la frontera anterior. Para ello, escribimos la ecuación en la forma

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \mathcal{E}y \right) \psi = E\psi \tag{1.7}$$

y pasamos a la representación del momento mediante el cambio: $\hat{p} \rightarrow p$, $y \rightarrow i\hbar \frac{d}{dp}$. Con esto, la ecuación anterior se transforma en la ecuación diferencial

$$\left(\frac{p^2}{2m} + i\hbar\mathcal{E} \frac{d}{dp} \right) \phi(p) = E\phi(p), \tag{1.8}$$

donde la función $\phi(p)$ está relacionada a la función de onda $\psi_E(y)$ mediante la transformada de Fourier[10]

$$\psi(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}py} dp. \quad (1.9)$$

Para resolver la ecuación (1.8) separamos variables para tener

$$\frac{d\phi}{\phi} = -\frac{1}{i\hbar} \left(\frac{p^2}{2m\mathcal{E}} - \frac{E}{\mathcal{E}} \right) dp$$

al integrar obtenemos del lado izquierdo el logaritmo de ϕ , de tal manera que, al tomar la exponencial de ambos lados, queda

$$\phi(p) = C e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^3}{6m\mathcal{E}} - \frac{Ep}{\mathcal{E}} \right)} \quad (1.10)$$

donde C es una constante de integración.

Ahora usamos (1.9) para obtener la función de onda en la representación de coordenadas

$$\psi(y) = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^3}{6m\mathcal{E}} - \frac{Ep}{\mathcal{E}} + py \right)} dp. \quad (1.11)$$

Separando el intervalo de integración en dos y tomando en cuenta que el argumento de la exponencial del integrando es impar en la variable p , obtenemos

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} C \int_0^{\infty} \cos \left[\frac{p^3}{6\hbar m\mathcal{E}} + \frac{p}{\hbar} \left(y - \frac{E}{\mathcal{E}} \right) \right] dp \quad (1.12)$$

Los estados estacionarios del sistema se obtienen a partir de la solución anterior e imponiendo la condición en la frontera (1.6).

1.2 Reducción a la ecuación de Airy

En la representación de coordenadas la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ecuación (1.7), se transforma en la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dy^2} + \mathcal{E}y\psi = E\psi. \quad (1.13)$$

Para simplificar esta ecuación hacemos el siguiente cambio de variable:

$$y = ax + b, \quad (1.14)$$

donde a y b son constantes que luego serán determinadas. Debido a este cambio de variable el operador de segunda derivada se transforma en

$$\frac{d^2}{dy^2} = \frac{1}{a^2} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Sustituyendo estos cambios en la ecuación (1.13), obtenemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{E}(ax + b) - E \right] \psi(x) = 0.$$

Multiplicando por el factor $-\frac{2ma^2}{\hbar^2}$ esta ecuación se reduce a

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m\mathcal{E}a^3}{\hbar^2} x - \frac{2ma^2}{\hbar^2} (\mathcal{E}b - E) \right] \psi(x) = 0,$$

ahora escogemos los parámetros a y b de tal manera que el coeficiente del término lineal en x sea uno y que el término independiente de x sea cero, esto es, escogemos a y b como

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}} \right)^{1/3} \quad (1.15)$$

y

$$b = \frac{E}{\mathcal{E}}. \quad (1.16)$$

Con estos coeficientes tenemos finalmente la ecuación

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \psi(x) = 0, \quad (1.17)$$

esta ecuación se llama Ecuación de Airy[11]. Por lo tanto, el cambio de variable que nos lleva de la ecuación (1.13) a la ecuación de Airy es

$$x = \frac{y}{a} - \frac{E}{\mathcal{E}a}. \quad (1.18)$$

Note que a tiene dimensiones de longitud, representa una longitud característica del sistema, y en consecuencia x es una variable adimensional.

A continuación resolveremos la ecuación de Airy usando el método de solución en serie de potencias o método de Frobenius².

²En el apéndice A se resuelve la ecuación de Airy transformando a una ecuación de Bessel.

1.3 Solución general de la ecuación de Airy

Para encontrar la solución general de la ecuación de Airy con el método de solución en series escribimos la ecuación de Airy, ecuación (1.17), en la siguiente forma

$$u'' - xu = 0 \quad (1.19)$$

Debido a que la ecuación de Airy no tiene singularidades, podemos expresar la función $u(x)$ mediante un desarrollo de potencias alrededor del origen

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad (1.20)$$

donde los coeficientes a_n están por determinarse.

La segunda derivada de la función $u(x)$ la obtenemos directamente de la ecuación (1.20),

$$u''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2}. \quad (1.21)$$

Sustituyendo (1.20) y este resultado en la ecuación de Airy, (1.19), obtenemos

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+1} = 0$$

y después de agrupar las potencias iguales de x queda

$$2a_2 + \sum_{n=1}^{\infty} [(n+1)(n+2)a_{n+2} - a_{n-1}] x^n = 0. \quad (1.22)$$

Debido a la independencia lineal de las potencias de x , cada coeficiente de la expresión anterior debe ser cero, es decir, se debe cumplir:

$$2a_2 = 0 \quad (1.23)$$

y

$$(n+1)(n+2)a_{n+2} - a_{n-1} = 0 \quad (1.24)$$

para $n = 1, 2, \dots$

De la ecuación (1.23) obtenemos que el coeficiente a_2 es cero, $a_2 = 0$, y el resto de los coeficientes se calculan a partir de la fórmula de recurrencia que se obtiene de (1.24), es decir, los coeficientes satisfacen la relación:

$$a_{n+2} = \frac{a_{n-1}}{(n+1)(n+2)} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.25)$$

Note que, conocido un coeficiente, de la fórmula de recurrencia podemos conocer los coeficientes con índice que difieren por un múltiplo de 3 del coeficiente dado.

Como $a_2 = 0$, se sigue de la fórmula de recurrencia que los coeficientes a_5, a_8, a_{11}, \dots son cero, esto es

$$a_{3k+2} = 0 \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.26)$$

Por su parte, de la fórmula de recurrencia obtenemos el resto de los coeficientes a partir de a_0 y a_1 , los primeros coeficientes están dados por

$$a_3 = \frac{a_0}{3 \cdot 2}$$

$$a_4 = \frac{a_1}{4 \cdot 3}$$

$$a_6 = \frac{a_0}{6 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 2}$$

$$a_7 = \frac{a_1}{7 \cdot 6 \cdot 4 \cdot 3}$$

De aquí podemos inducir fácilmente que el resto de los coeficientes están dados por las fórmulas:

$$a_{3n} = \frac{a_0}{(3n)(3n-1)\dots 6 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 2} \quad (1.27)$$

$$a_{3n+1} = \frac{a_1}{(3n+1)(3n)\dots 7 \cdot 6 \cdot 4 \cdot 3} \quad (1.28)$$

para $n = 1, 2, 3, \dots$

Note que en la primera expresión, en el denominador están ausentes los factores $1, 4, 7, \dots, (3n-2)$, que permiten completar el factorial, mientras que en la segunda expresión no se encuentran los factores $2, 5, 8, \dots, (3n-1)$. Por lo tanto la solución (1.20) puede escribirse en la forma

$$u(x) = a_0 \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 \cdot 4 \cdot 7 \dots (3n-2)}{(3n)!} x^{3n} \right] + a_1 \left[x + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \cdot 5 \cdot 8 \dots (3n-1)}{(3n+1)!} x^{3n+1} \right] \quad (1.29)$$

Como a_0 y a_1 son constantes arbitrarias, mediante el método de Frobenius hemos obtenido la solución general a la ecuación de Airy.

Podemos escribir la ecuación anterior en términos del símbolo de Pochhammer, definido como

$$(\alpha)_k = \alpha(\alpha + 1)(\alpha + 2) \cdots (\alpha + k - 1) = \frac{\gamma(\alpha + k)}{\gamma(\alpha)}$$

donde $\gamma(x)$ es la función gama. Usando este símbolo se pueden demostrar las identidades

$$\begin{aligned} 1 \cdot 4 \cdot 7 \cdots (3n - 2) &= 3^n \left(\frac{1}{3}\right)_n \\ 2 \cdot 5 \cdot 8 \cdots (3n - 1) &= 3^n \left(\frac{2}{3}\right)_n \end{aligned}$$

Sustituyendo en (1.29) estas identidades, la solución general de la ecuación de Airy (1.19) se escribe como

$$u(x) = a_0 \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n}}{(3n)!} \right] + a_1 \left[x + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n+1}}{(3n+1)!} \right] \quad (1.30)$$

Esta solución converge para toda x finita, pero diverge para $x \rightarrow \infty$ ya que conforme x se va a infinito cada solución particular diverge. Es posible construir, mediante una combinación lineal de estas soluciones particulares una solución que converge cuando $x \rightarrow \infty$ junto a otra que se lleva la divergencia. Claramente la solución convergente es la que representa los estados estacionarios del sistema y será construida en la siguiente sección.

1.4 Función de Airy

Como vimos en la sección 1.1, la función de onda $\psi(y)$ asociada a cada estado estacionario del rebotador cuántico es proporcional a la expresión integral

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} C \int_0^{\infty} \cos \left[\frac{p^3}{6\hbar m \mathcal{E}} + \frac{p}{\hbar} \left(y - \frac{E}{\mathcal{E}} \right) \right] dp. \quad (1.31)$$

Cambiando la variable de integración mediante

$$t = \frac{a}{\hbar} p \quad (1.32)$$

donde a está dada por (1.15) y usando la variable x definida en (1.18), obtenemos

$$\psi(x) = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}} C \int_0^\infty \cos \left[\frac{1}{3} t^3 + tx \right] dt. \quad (1.33)$$

Como esta función es solución de la ecuación de Schrödinger, que se reduce a la ecuación de Airy, entonces se puede expresar como una combinación lineal de las dos soluciones independientes que se construyeron en la sección anterior, esto es

$$\psi(x) = A \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{3} \right)_n \frac{3^n x^{3n}}{(3n)!} \right] + B \left[x + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{3} \right)_n \frac{3^n x^{3n+1}}{(3n+1)!} \right]. \quad (1.34)$$

Como la segunda serie es cero en el origen, en tanto que la primera serie es uno, se sigue que A está dada por $A = \psi(0)$; de la misma forma, tomando la derivada con respecto a x , se sigue que $B = \psi'(0)$, aquí la prima indica la derivada de la función. De (1.33) se sigue entonces

$$A = \bar{C} \int_0^\infty \cos \left[\frac{1}{3} t^3 \right] dt \quad (1.35)$$

y

$$B = -\bar{C} \int_0^\infty t \sin \left[\frac{1}{3} t^3 \right] dt, \quad (1.36)$$

donde en \bar{C} hemos absorbido todos los factores constantes: $\bar{C} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}} C$. Ahora cambiamos a la variable

$$z = \frac{1}{3} t^3 \quad (1.37)$$

queda

$$A = \frac{1}{3^{\frac{2}{3}}} \bar{C} \int_0^\infty \frac{\cos z}{z^{\frac{2}{3}}} dz \quad (1.38)$$

y

$$B = -\frac{1}{3^{\frac{1}{3}}} \bar{C} \int_0^\infty \frac{\sin z}{z^{\frac{1}{3}}} dz. \quad (1.39)$$

Para calcular estas integrales partimos de la expresión para la función gamma

$$\Gamma(r) = \int_0^\infty t^{r-1} e^{-t} dt$$

y sustituimos la variable de integración t por zt , con z real, para tener

$$\Gamma(r) = z^r \int_0^\infty t^{r-1} e^{-zt} dt.$$

Despejando el inverso del factor z^r , multiplicando por e^{iz} e integrando con respecto a z de cero a infinito, obtenemos

$$\int_0^\infty \frac{e^{iz}}{z^r} dz = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \int_0^\infty t^{r-1} e^{iz-zt} dt dz.$$

Realizando la integral con respecto a z queda

$$\int_0^\infty \frac{e^{iz}}{z^r} dz = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{t^{r-1}}{t-i} dt$$

multiplicando numerador y denominador del integrando del lado derecho por el factor $(t+i)$ y separando la ecuación en parte real e imaginaria, resulta

$$\int_0^\infty \frac{\cos z}{z^r} dz = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{t^r}{1+t^2} dt$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin z}{z^r} dz = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{t^{r-1}}{1+t^2} dt$$

cambiando la variable de integración del lado derecho por $t = \sqrt{v}$

$$\int_0^\infty \frac{\cos z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} \int_0^\infty v^{\frac{r-1}{2}} (1+v)^{-1} dv$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} \int_0^\infty v^{\frac{r-2}{2}} (1+v)^{-1} dv$$

cada integral es una función beta[11], por lo tanto

$$\int_0^\infty \frac{\cos z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} B\left(\frac{r+1}{2}, 1 - \frac{r+1}{2}\right)$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} B\left(\frac{r}{2}, 1 - \frac{r}{2}\right)$$

en términos de funciones gama, queda

$$\int_0^\infty \frac{\cos z}{z^r} dz = \frac{\Gamma\left(\frac{r+1}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{r+1}{2}\right)}{2\Gamma(r)}$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin z}{z^r} dz = \frac{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{r}{2}\right)}{2\Gamma(r)}$$

finalmente con la identidad

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x}$$

queda

$$\int_0^\infty \frac{\cos z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{r+1}{2}\right)} \quad (1.40)$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin z}{z^r} dz = \frac{1}{2\Gamma(r)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{r}{2}\right)} \quad (1.41)$$

Usando estos resultados en (1.38) y (1.39) obtenemos los coeficientes A y B en la forma

$$A = \frac{\bar{C}}{3^{\frac{2}{3}} 2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \frac{1}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \quad (1.42)$$

$$B = -\frac{\bar{C}}{3^{\frac{1}{3}} 2\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} \frac{1}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \quad (1.43)$$

aquí hemos hecho uso de $\sin \frac{5\pi}{6} = \sin \frac{\pi}{6}$.

Sustituyendo los coeficientes A y B en la ecuación (1.34), la función de onda del estado estacionario del rebotador cuántico se puede escribir como

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{\bar{C}}{3^{\frac{2}{3}} 2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \frac{1}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n}}{(3n)!} \right] \\ & - \frac{\bar{C}}{3^{\frac{1}{3}} 2\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} \frac{1}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \frac{\pi}{\sin \pi \left(\frac{1}{6}\right)} \left[x + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n+1}}{(3n+1)!} \right] \end{aligned} \quad (1.44)$$

Absorbiendo los factores comunes en la constante arbitraria \bar{C} y factorizándola, la función de onda $\psi(x)$ se escribe como

$$\psi(x) = \bar{C} Ai(x) \quad (1.45)$$

aquí hemos definido la función

$$Ai(x) = \frac{1}{3^{\frac{2}{3}} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n}}{(3n)!} \right] - \frac{1}{3^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} \left[x + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{3}\right)_n \frac{3^n x^{3n+1}}{(3n+1)!} \right] \quad (1.46)$$

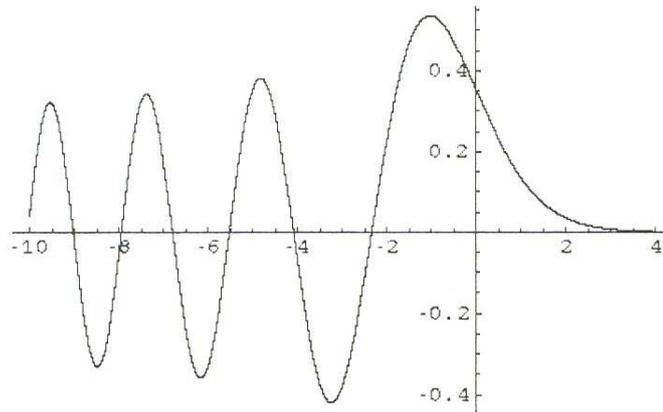


Figura 1.2: Gráfica de la función de Airy.

llamada función de Airy[11].

En la Figura 1.2 presentamos la gráfica de la función $Ai(x)$.

La función de Airy, $Ai(x)$, presenta dos comportamientos muy característicos. El primero es que para x positivo, la función decrece exponencialmente y para x negativo la función oscila en forma senoidal con la amplitud de las oscilaciones disminuyendo conforme x decrece. La segunda característica que se resalta es el hecho de que esta función no tiene ningún cero para valores de x positivos, todos sus ceros son encontrados para valores de x negativos. Además los ceros de la función de Airy son simples.

En virtud de que no se cuenta con expresiones analíticas para el cálculo de los ceros de la función de Airy, hemos diseñado un programa en lenguaje C que nos permite calcular los ceros ordenados de la función de Airy con una aproximación de 6 dígitos significativos. Dicho programa se encuentra en el apéndice B y fue usado para generar los ceros que se presentan en este trabajo.

La siguiente tabla muestra los primeros 24 ceros ordenados de $Ai(x)$

n	x_n	n	x_n
1	-2.338107	13	-15.340755
2	-4.087949	14	-16.132685
3	-5.520560	15	-16.905634
4	-6.786708	16	-17.661301
5	-7.944133	17	-18.401133
6	-9.022651	18	-19.126381
7	-10.040174	19	-19.838131
8	-11.008524	20	-20.537333
9	-11.936015	21	-21.224831
10	-12.828776	22	-21.901367
11	-13.691889	23	-22.567614
12	-14.527830	24	-23.224165

1.5 Eigenfunciones y espectro de la energía

Con el resultado (1.45) de la sección anterior, la función de onda del eigenestado de energía E del rebotador cuántico es

$$\psi_E(x) = C_E Ai(x) \quad (1.47)$$

donde C_E es la constante de normalización. Con ayuda de la ecuación (1.18) podemos escribirla en términos de la variable y , esto es

$$\psi_E(y) = C_E Ai\left(\frac{y}{a} - \frac{E}{\mathcal{E}a}\right). \quad (1.48)$$

Como la función de onda debe satisfacer la condición en la frontera (1.6), se debe cumplir

$$C_E Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) = 0 \quad (1.49)$$

es decir, $-\frac{E}{\mathcal{E}a}$ es un cero de la función de Airy.

Como vimos en la sección anterior, los ceros de la función de Airy son todos negativos y se calculan numéricamente, si con x_n denotamos los ceros ordenados en forma decreciente, entonces el espectro de energía del rebotador cuántico está dado por

$$E_n = \mathcal{E}a |x_n| \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.50)$$

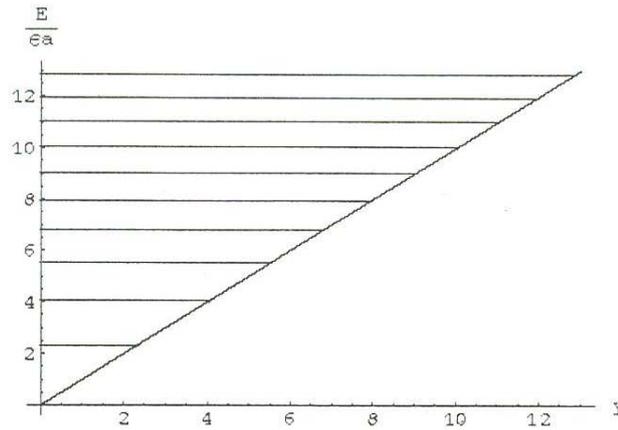


Figura 1.3: Primeros niveles del espectro de energía del rebotador cuántico

Note que los niveles de energía son discretos, es decir, la energía está cuantizada. En la Figura 1.3 hemos graficado los primeros diez niveles de energía.

Reuniendo el resultado (1.50) con (1.48) las eigenfunciones son

$$\psi_n(y) = C_n Ai\left(\frac{y}{a} - |x_n|\right) \quad (1.51)$$

para $n = 1, 2, 3, \dots$. En la Figura 1.4 graficamos las tres primeras

1.6 Normalización

En esta sección normalizamos la función de onda (1.48). Para calcular la constante de normalización C_E que multiplica a la función de onda es necesario imponer la condición de normalización

$$\int_0^\infty \psi_E^2(y) dy = 1, \quad (1.52)$$

pero no es posible calcular esta integral por sustitución directa de (1.51) ya que ésta es una serie infinita, por ello usaremos un método alternativo.

Asumimos que la ecuación anterior la podemos escribir de la siguiente manera

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \psi_E(y) \psi_{E+\epsilon}(y) dy = 1, \quad (1.53)$$

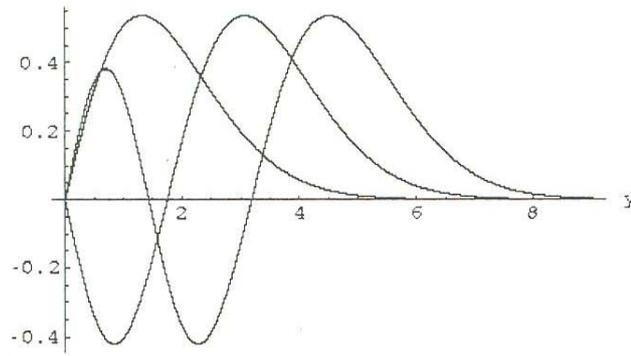


Figura 1.4: Eigenfunciones del rebotador cuántico para el estado base y primeros dos estados excitados.

donde $\psi_{E+\epsilon}(y)$ es un eigenestado del hamiltoniano con energía ligeramente diferente que E . Sin embargo, $\psi_{E+\epsilon}$ no tiene la condición en la frontera correcta en $x = 0$, ya que la condición en la frontera se cumple únicamente para los estados con energía $E_n = \mathcal{E}a|x_n|$, pero es la función correcta en el límite $\epsilon \rightarrow 0$.

La eigenfunción $\psi_E(y)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la energía E , es decir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E}{dy^2} + \mathcal{E}y\psi_E = E\psi_E,$$

Por su parte, la ecuación de Schrödinger para el eigenestado de energía $E + \epsilon$ es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{E+\epsilon}}{dy^2} + \mathcal{E}y\psi_{E+\epsilon} = (E + \epsilon)\psi_{E+\epsilon},$$

siguiendo el procedimiento usual de multiplicar la primera ecuación por $\psi_{E+\epsilon}$, la segunda por ψ_E y después tomar la diferencia de las ecuaciones, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi_E \frac{d^2\psi_{E+\epsilon}}{dy^2} - \psi_{E+\epsilon} \frac{d^2\psi_E}{dy^2} \right) = \epsilon \psi_{E+\epsilon} \psi_E$$

Esta ecuación se puede expresar como

$$\psi_E \psi_{E+\epsilon} = -\frac{\hbar^2}{2m\epsilon} \frac{d}{dy} \left(\psi_E \psi'_{E+\epsilon} - \psi_{E+\epsilon} \psi'_E \right),$$

donde con una prima indicamos la derivada con respecto a y . Integrando entre cero e infinito ambos lados de la ecuación resulta

$$\int_0^{\infty} \psi_E(y)\psi_{E+\epsilon}(y)dy = -\frac{\hbar^2}{2m\epsilon} \left[\psi_E\psi'_{E+\epsilon} - \psi_{E+\epsilon}\psi'_E \right]_0^{\infty}. \quad (1.54)$$

Debido a que ψ_E se anula tanto en el origen como al infinito, al evaluar el primer término del lado derecho en los límites de integración, el resultado es cero. El segundo término se anula al infinito, pero no se anula en el origen debido a que la función $\psi_{E+\epsilon}$ no es cero en $y = 0$.

De esta manera, la ecuación (1.54) se reduce a

$$\int_0^{\infty} \psi_E(y)\psi_{E+\epsilon}(y)dy = -\frac{\hbar^2}{2m\epsilon} \psi_{E+\epsilon}(0)\psi'_E(0). \quad (1.55)$$

De la ecuación (1.48) tenemos que $\psi_E(y)$ es proporcional a la función de Airy, por lo tanto

$$\psi_{E+\epsilon}(0) = C_{E+\epsilon} Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a} - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a}\right) \quad (1.56)$$

$$\psi'_E(0) = \frac{1}{a} C_E Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) \quad (1.57)$$

donde $Ai'(y)$ es la derivada de la función de Airy.

Sustituyendo (1.56) y (1.57) en (1.55) obtenemos

$$\int_0^{\infty} \psi_E(y)\psi_{E+\epsilon}(y)dy = -\frac{\hbar^2}{2ma\epsilon} C_{E+\epsilon} C_E Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a} - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a}\right) Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) \quad (1.58)$$

Desarrollando la función $Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a} - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a}\right)$ en una serie de Taylor alrededor del punto $-\frac{E}{\mathcal{E}a}$, obtenemos la función en serie de potencias de ϵ

$$Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a} - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a}\right) = Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a} Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) + \frac{\epsilon^2}{2\mathcal{E}^2 a^2} Ai''\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (1.59)$$

donde $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ indica que los términos restantes están acotados por ϵ^3 cuando se toma el límite $\epsilon \rightarrow 0$.

De la ecuación de Airy, ecuación (1.17), se sigue que

$$Ai''\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) = -\frac{E}{\mathcal{E}a} Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right).$$

Sustituyendo esta identidad en (1.59) queda

$$Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a} - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a}\right) = \left(1 - \frac{\epsilon^2 E}{2\mathcal{E}^3 a^3}\right) Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a} Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^3)$$

Usando este resultado en (1.58) obtenemos

$$\int_0^\infty \psi_E(y) \psi_{E+\epsilon}(y) dy = \frac{\hbar^2}{2ma\epsilon} C_{E+\epsilon} C_E \left\{ \left(1 - \frac{\epsilon^2 E}{2\mathcal{E}^3 a^3}\right) Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) - \frac{\epsilon}{\mathcal{E}a} \left[Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) \right]^2 \right\} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Ahora tomamos el caso particular en que E es un eigenvalor de la energía, por lo tanto se cumple

$$Ai\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) = 0$$

y el primer término del lado derecho en la ecuación anterior es cero. Queda así,

$$\int_0^\infty \psi_E(y) \psi_{E+\epsilon}(y) dy = \frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}a^2} C_{E+\epsilon} C_E \left[Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) \right]^2 + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Finalmente tomando el límite $\epsilon \rightarrow 0$ obtenemos

$$\int_0^\infty \psi_E^2(y) dy = \frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}a^2} C_E^2 \left[Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right) \right]^2$$

Para que la integral del lado izquierdo sea igual a uno se requiere que la constante de normalización esté dada por

$$C_E = \sqrt{\frac{2m\mathcal{E}a^2}{\hbar^2} \frac{1}{Ai'\left(-\frac{E}{\mathcal{E}a}\right)}}. \quad (1.60)$$

1.7 Valor esperado de y

Nos proponemos ahora encontrar el valor esperado de la posición en el estado $\psi_E(y)$. Denotando con y_{EE} este valor esperado, tenemos

$$y_{EE} = \int_0^\infty y |\psi_E(y)|^2 dy. \quad (1.61)$$

De la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ecuación (1.13), despejamos $y\psi_E(y)$

$$y\psi_E(y) = \frac{E}{\mathcal{E}}\psi_E(y) + \frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}} \frac{d^2\psi_E(y)}{dy^2},$$

y sustituimos en (1.61)

$$y_{EE} = \frac{E}{\mathcal{E}} \int_0^\infty \psi_E^2(y) dy + \frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}} \int_0^\infty \psi_E(y) \frac{d^2\psi_E(y)}{dy^2} dy. \quad (1.62)$$

Como ψ_E está normalizada, la primera integral es igual a uno, nos queda

$$y_{EE} = \frac{E}{\mathcal{E}} + J(E), \quad (1.63)$$

donde hemos denotado con $J(E)$ el segundo término del lado derecho de (1.62), es decir

$$J(E) = \frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}} \int_0^\infty \psi_E(y) \frac{d^2\psi_E(y)}{dy^2} dy. \quad (1.64)$$

Sabemos que $\psi_E(y)$ depende de la variable $\frac{y}{a} - \frac{E}{\mathcal{E}a}$; por ello, derivar con respecto a y es lo mismo que derivar con respecto al parámetro E , salvo por el factor $-\mathcal{E}$, esto es

$$\frac{d}{dy} = -\mathcal{E} \frac{d}{dE} \quad (1.65)$$

y

$$\frac{d^2}{dy^2} = \mathcal{E}^2 \frac{d^2}{dE^2}. \quad (1.66)$$

Asumimos que la segunda derivada con respecto a E la podemos obtener a través del límite

$$\frac{d^2\psi_E(y)}{dE^2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} [\psi_{E+\epsilon}(y) - 2\psi_E(y) + \psi_{E-\epsilon}(y)]. \quad (1.67)$$

Sustituyendo (1.66) y (1.67) en (1.64) obtenemos

$$J(E) = \frac{\hbar^2\mathcal{E}}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} \int_0^\infty [\psi_{E+\epsilon}(y) - 2\psi_E(y) + \psi_{E-\epsilon}(y)] \psi_E(y) dy. \quad (1.68)$$

La segunda integral es igual a uno debido a la normalización y nos queda

$$J(E) = \frac{\hbar^2 \mathcal{E}}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} [Q(E + \epsilon) - 2 + Q(E - \epsilon)], \quad (1.69)$$

donde hemos definido la cantidad

$$Q(E \pm \epsilon) = \int_0^\infty \psi_{E \pm \epsilon}(y) \psi_E(y) dy. \quad (1.70)$$

Para calcular esta última expresión, reproducimos el procedimiento utilizado para el cálculo de la constante de normalización, obtenemos para nuestro caso

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dy} \left[\psi_E(y) \frac{d\psi_{E \pm \epsilon}(y)}{dy} - \psi_{E \pm \epsilon}(y) \frac{d\psi_E(y)}{dy} \right] = \pm \epsilon \psi_{E \pm \epsilon}(y) \psi_E(y)$$

Despejando el producto $\psi_{E \pm \epsilon}(y) \psi_E(y)$ e integrando entre cero e infinito obtenemos

$$Q(E \pm \epsilon) = \mp \frac{\hbar^2}{2m\epsilon} \left[\psi_E(y) \frac{d\psi_{E \pm \epsilon}(y)}{dy} - \psi_{E \pm \epsilon}(y) \frac{d\psi_E(y)}{dy} \right]_0^\infty. \quad (1.71)$$

Como ψ_E se anula en el origen y al infinito, el primer término es cero. El segundo término se anula al infinito, pero no se anula en el origen porque $\psi_{E \pm \epsilon}$ es un eigenestado con energía ligeramente diferente que E , recordemos que los eigenestados con energía E se obtienen a partir de la condición en la frontera $\psi_E(0) = 0$. Con esto nos queda

$$Q(E \pm \epsilon) = \mp \frac{\hbar^2}{2m\epsilon} \psi_{E \pm \epsilon}(0) \psi'_E(0), \quad (1.72)$$

donde la prima indica derivada con respecto a y . Con ayuda de la identidad (1.65) obtenemos

$$Q(E \pm \epsilon) = \pm \frac{\hbar^2 \mathcal{E}}{2m\epsilon} \psi_{E \pm \epsilon}(0) \psi'_E(0), \quad (1.73)$$

y ahora la prima indica derivada con respecto a E .

Para calcular la expresión anterior desarrollamos $\psi_{E \pm \epsilon}$ en serie de Taylor alrededor de $\epsilon = 0$ para tener

$$\psi_{E \pm \epsilon}(0) = \psi_E(0) \mp \frac{\epsilon}{\mathcal{E}} \psi'_E(0) + \frac{\epsilon^2}{2\mathcal{E}^2} \psi''_E(0) \mp \frac{\epsilon^3}{6\mathcal{E}^3} \psi'''_E(0) + \mathcal{O}(\epsilon^4)$$

Aquí las primas indican derivadas con respecto a la variable y . El primer término es cero, debido a que en $y = 0$ la función de onda se anula para cumplir con la condición en la frontera. De igual manera el tercer término será también cero, ya que como se sigue de la ecuación de Schrödinger la segunda derivada de ψ_E calculada en el origen es cero. El cuarto término lo podemos expresar en función de $\psi'_E(0)$, esto es

$$\psi'''_E(0) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi'_E(0),$$

con todo esto obtenemos

$$\begin{aligned} \psi_{E \pm \epsilon}(0) &= \mp \frac{\epsilon}{\mathcal{E}} \psi'_E(0) \mp \frac{\epsilon^3}{6\mathcal{E}^3} \left[-\frac{2m}{\hbar^2} E \psi'_E(0) \right] + \mathcal{O}(\epsilon^4) \\ &= \mp \frac{\epsilon}{\mathcal{E}} \left(1 - \frac{m\epsilon^2 E}{3\mathcal{E}^2 \hbar^2} \right) \psi'_E(0) + \mathcal{O}(\epsilon^4). \end{aligned} \quad (1.74)$$

Con ayuda de (1.65) cambiamos la derivada con respecto a y por la derivada con respecto a E , para tener

$$\psi_{E \pm \epsilon}(0) = \pm \epsilon \left(1 - \frac{m\epsilon^2 E}{3\mathcal{E}^2 \hbar^2} \right) \psi'_E(0) + \mathcal{O}(\epsilon^4).$$

Sustituyendo el resultado anterior en (1.73), el doble signo se cancela y en la aproximación más baja del parámetro ϵ las dos expresiones para $Q(E \pm \epsilon)$ coinciden, simplificando queda

$$Q(E \pm \epsilon) = \frac{\hbar^2 \mathcal{E}}{2m} \left(1 - \frac{m\epsilon^2 E}{3\mathcal{E}^2 \hbar^2} \right) [\psi'_E(0)]^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (1.75)$$

de las ecuaciones (1.57) y (1.60) se sigue que $\psi'_E(0)$ está dado por

$$\psi'_E(0) = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \mathcal{E}}}$$

y con esto la ecuación (1.75) se reduce a

$$Q(E \pm \epsilon) = 1 - \frac{m\epsilon^2 E}{3\mathcal{E}^2 \hbar^2} + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (1.76)$$

Sustituyendo estos resultados en la expresión (1.69) obtenemos

$$J(E) = \frac{\hbar^2 \mathcal{E}}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} \left[2 \left(1 - \frac{m\epsilon^2 E}{3\mathcal{E}^2 \hbar^2} \right) - 2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \right].$$

y tomando explícitamente el límite $\epsilon \rightarrow 0$, queda

$$J(E) = -\frac{E}{3\mathcal{E}}. \quad (1.77)$$

Finalmente, sustituyendo este resultado en (1.63) obtenemos el valor esperado de la posición

$$y_{EE} = \frac{2E}{3\mathcal{E}} \quad (1.78)$$

Este resultado coincide con el promedio temporal de la posición del problema clásico

2. El método variacional

Muchos problemas en la mecánica cuántica no se pueden resolver exactamente; debido a ello se han construido otros métodos que nos dan soluciones que se aproximan al valor real. Así, aparecen los métodos de aproximación que se emplean para obtener valores aproximados de la energía de ciertos estados del sistema por ser calculados. Aquí discutiremos el método variacional, el cual es especialmente aplicable al estado de energía más bajo del sistema; éste estado es el de mayor interés en muchas ramas de la ciencia, particularmente en la Química.

2.1 El método variacional tradicional

A continuación mostraremos que la integral

$$E = \int \phi^* \hat{H} \phi dx \quad (2.1)$$

es una cota superior a la energía, W_0 , del estado base de un sistema. Aquí, \hat{H} es el operador hamiltoniano del sistema bajo discusión y $\phi(x)$ es una función a la cual se le pide que sea normalizable y que, en general, satisfaga las condiciones en la frontera del problema en consideración. Esta función no tiene restricciones, su elección dependerá de las condiciones del problema tratado, pero claramente una mejor elección llevará a un valor de E más cercano a W_0 , es decir a una mejor predicción.

Consideremos una función ϕ , llamada función de prueba, normalizada,

$$\int \phi^* \phi dx = 1, \quad (2.2)$$

si tomamos para nuestra función ϕ , la función de onda exacta, ψ_0 , para el estado base, la predicción E igualaría a W_0 ; esto es,

$$E = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 dx = W_0, \quad (2.3)$$

ya que ψ_0 es eigenfunción de \hat{H} ,

$$\hat{H}\psi_0 = W_0\psi_0. \quad (2.4)$$

Si ϕ no es igual a ψ_0 , entonces podemos desarrollar la función en términos del conjunto completo de eigenfunciones normalizadas y ortogonales $\{\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n, \dots\}$ del hamiltoniano \hat{H} , para tener

$$\phi = \sum_n a_n \psi_n, \quad (2.5)$$

con los coeficientes a_n satisfaciendo la condición

$$\sum_n a_n^* a_n = 1 \quad (2.6)$$

lo cual se sigue del hecho de que ϕ está normalizada.

Sustituyendo el desarrollo (2.5) en la integral de E , (2.1), obtenemos

$$\begin{aligned} E &= \int \phi^* \hat{H} \phi dx \\ &= \sum_n \sum_{n'} a_n^* a_{n'} \int \psi_n^* \hat{H} \psi_{n'} dx \\ &= \sum_n a_n^* a_n W_n, \end{aligned} \quad (2.7)$$

ya que las funciones ψ_n satisfacen la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H}\psi_n = W_n\psi_n.$$

Restando la energía del estado base, W_0 , en cada miembro de la ecuación (2.7), obtenemos

$$E - W_0 = \sum_n a_n^* a_n (W_n - W_0), \quad (2.8)$$

donde hemos hecho uso de (2.6).

Como W_n es mayor o igual a W_0 para todos los valores de n y los coeficientes $a_n^* a_n$ son positivos o igual a cero, el lado derecho de la ecuación anterior es positivo o igual a cero. De esta manera se ha probado que E es siempre una cota superior a W_0 ; esto es,

$$\int \phi^*(x) \hat{H} \phi(x) dx \geq W_0. \quad (2.9)$$

Esta es la base del método variacional para el cálculo aproximado de la energía del estado base de un sistema. Si se escoge un conjunto de funciones de prueba $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$ y se calculan los valores E_1, E_2, E_3, \dots correspondientes, entonces cada valor de E es mayor que la energía W_0 , de acuerdo al resultado anterior, así que el más bajo de estos valores es el más cercano a W_0 y en consecuencia la mejor predicción. Estas funciones se pueden obtener a partir de una familia de funciones parametrizadas, por ejemplo por el parámetro β , de tal manera que una función se diferencia de otra función por el solo hecho de tener valores diferentes del parámetro β . La presencia del parámetro permite obtener E como función de β

$$E(\beta) = \int \phi^*(x, \beta) \hat{H} \phi(x, \beta) dx \quad (2.10)$$

Ahora mediante un proceso de minimización de $E(\beta)$ respecto al parámetro β , obtenemos la mejor aproximación a W_0 , que corresponde al valor óptimo de dicho parámetro: $E_m = E(\beta_m)$, donde β_m es solución de

$$\left. \frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta_m} = 0,$$

de esta manera E_m es la mínima cota superior obtenida a través del conjunto de funciones de prueba $\{\phi(x, \beta)\}$.

La calidad del resultado depende de la calidad de la función de prueba $\phi(x, \beta)$, por lo que la elección de estas funciones es crucial. En general, es conveniente partir con funciones matemáticamente simples cuidando que tengan las propiedades adecuadas al problema dado. Por ejemplo, la función ϕ para el estado base no debe tener nodos; la paridad de ϕ debe ser la correcta; si se trata de estados ligados, ϕ debe decrecer exponencialmente en el infinito; deben respetarse las simetrías propias del problema, etc. Si se hace una elección razonable de la función de prueba, uno o dos parámetros son normalmente suficientes para obtener buenas aproximaciones en problemas simples.

Si E es igual a W_0 entonces ϕ debe ser idéntica a ψ_0 , así se asume que si E es casi igual a W_0 la función ϕ será muy cercana al valor real de la función ψ_0 . El método variacional es usado frecuentemente para obtener funciones de onda aproximadas así como valores aproximados de la energía. Por otro lado, el método variacional tiene la desventaja de que sólo proporciona una cota superior a la energía, sin indicar qué tan lejos está el valor real.

Para ilustrar este método, a continuación presentaremos dos casos en los cuales aplicamos el método variacional.

2.1.1 Oscilador armónico

El hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional está dado por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.11)$$

Para estimar la energía del estado base de este sistema mediante el método variacional, proponemos la siguiente familia de funciones de prueba dependiente de un parámetro:

$$\phi(x, \beta) = N e^{-\beta a^2 x^2}, \quad (2.12)$$

donde a es un parámetro fijo que tiene dimensiones de inverso de la distancia y β es un parámetro adimensional. No es difícil concluir a partir de las constantes m , ω y \hbar que el parámetro a está dado por

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (2.13)$$

La función (2.12) cumple las condiciones en la frontera del problema y la constante de normalización es obtenida mediante el proceso de integración

$$N = \left(\frac{2\beta a^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.14)$$

Aplicando el operador hamiltoniano, \hat{H} , a nuestra función de prueba, obtenemos

$$\hat{H}\phi = -\frac{\hbar^2 N}{2m} (4\beta^2 a^4 x^2 - 2\beta a^2) e^{-\beta a^2 x^2} + \frac{N}{2} m \omega^2 x^2 e^{-\beta a^2 x^2}, \quad (2.15)$$

de aquí calculamos la energía $E(\beta)$ sustituyendo la expresión anterior, junto con (2.12), en la ecuación (2.1), esto es

$$E(\beta) = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta a^2 x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (4\beta^2 a^4 x^2 - 2\beta a^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] e^{-\beta a^2 x^2} dx,$$

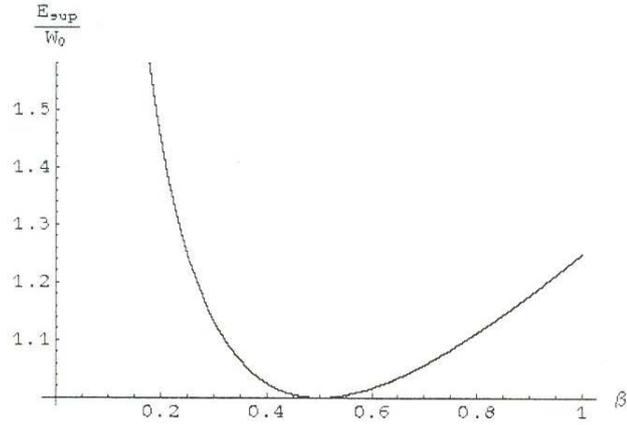


Figura 2.1: Gráfica de la energía como función del parámetro β .

y llevando a cabo las integrales indicadas resulta

$$E(\beta) = \frac{m\omega^2}{8\beta a^2} + \frac{\hbar^2\beta a^2}{2m}. \quad (2.16)$$

Sustituyendo el valor de a , a partir de la expresión (2.13), queda

$$E(\beta) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\frac{1}{4\beta} + \beta \right) \quad (2.17)$$

cuya gráfica se muestra en la Figura 2.1.

Se sigue de la gráfica de $E(\beta)$ que existe un valor del parámetro β para el cual la energía E es mínima; mediante el procedimiento usual encontramos el valor óptimo de β y así la mejor aproximación a W_0

$$\beta_m = \frac{1}{2} \quad (2.18)$$

y por lo tanto, la mejor aproximación a la energía del estado base del oscilador se consigue sustituyendo esta β_m en (2.17), queda

$$E_m = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (2.19)$$

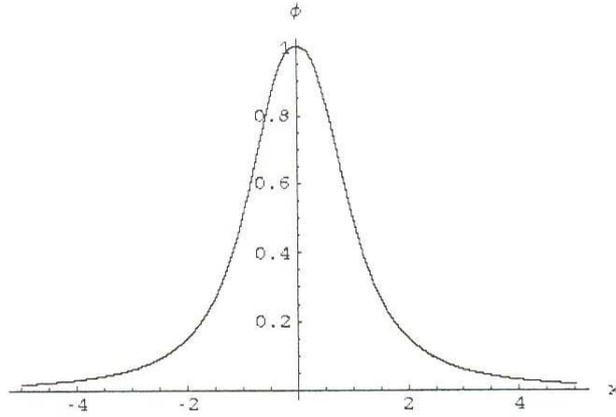


Figura 2.2: Función de prueba (2.21) para $\beta = 2.5$

y la función de prueba que mejor aproxima a la solución exacta es

$$\phi(x, \beta_m) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (2.20)$$

En el caso del oscilador armónico la energía del estado base es precisamente $\hbar\omega/2$ y nuestra predicción coincide con el valor exacto, por lo tanto la función de prueba (2.20) coincide con la solución exacta.

Ahora, con el propósito de mostrar el método variacional cuando la familia de funciones no contiene a la función de onda exacta, nos proponemos usar la siguiente familia de funciones de prueba que depende de un parámetro

$$\phi(x, \beta) = \frac{N}{1 + |ax|^\beta} \quad (2.21)$$

donde a está dada por (2.13) y β es el parámetro positivo adimensional el cual escogemos mayor que uno¹. En la Figura 2.2 mostramos el comportamiento típico de la función para valores del parámetro alrededor de dos.

La constante de normalización la calculamos mediante el procedimiento usual: como la función de onda es simétrica la integral de normalización sobre toda

¹Escogemos $\beta > 1$ para asegurar que el valor esperado de la energía potencial sea finito

la recta es equivalente a dos veces la integral de cero a infinito, es decir

$$2N^2 \int_0^\infty \frac{1}{(1 + a^\beta x^\beta)^2} dx = 1.$$

La integral de la expresión anterior corresponde al caso particular $m = 0$ y $n = 2$ de la integral $I_{m,n}(\beta)$ que se calcula en el apéndice C, con esto encontramos

$$N = \left[\frac{\beta a}{2\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.22)$$

Aplicando el operador hamiltoniano a la función de prueba obtenemos

$$\hat{H}\phi = \frac{\hbar^2 N}{2m} \left[\frac{a^\beta}{(1 + |ax|^\beta)^2} \frac{\partial^2 |x|^\beta}{\partial x^2} - \frac{2a^{2\beta}}{(1 + |ax|^\beta)^3} \left(\frac{\partial |x|^\beta}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} m\omega^2 N \frac{x^2}{1 + |ax|^\beta} \quad (2.23)$$

Tomando en cuenta que las derivadas de $|x|^\beta$ están dadas por

$$\frac{\partial |x|^\beta}{\partial x} = \beta |x|^{\beta-1} \begin{cases} 1 & , \quad \text{si } x > 0 \\ -1 & , \quad \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

y

$$\frac{\partial^2 |x|^\beta}{\partial x^2} = \beta(\beta - 1) |x|^{\beta-2}, \quad (2.25)$$

después de sustituir en (2.23) queda

$$\hat{H}\phi = \frac{\hbar^2 N}{2m} \left[\frac{\beta(\beta - 1)a^\beta}{(1 + |ax|^\beta)^2} |x|^{\beta-2} - \frac{2\beta^2 a^{2\beta}}{(1 + |ax|^\beta)^3} |x|^{2(\beta-1)} \right] + \frac{1}{2} m\omega^2 N \frac{x^2}{1 + |ax|^\beta}. \quad (2.26)$$

Multiplicando la expresión anterior por $\phi^*(x, \beta)$ e integrando en todo el eje real, recordando que por simetría la integral es el doble de la integral de cero a infinito, obtenemos la energía $E(\beta)$

$$E(\beta) = 2N^2 \int_0^\infty \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta(\beta - 1)a^\beta}{(1 + a^\beta x^\beta)^3} x^{\beta-2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2\beta^2 a^{2\beta}}{(1 + a^\beta x^\beta)^4} x^{2(\beta-1)} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{x^2}{(1 + a^\beta x^\beta)^2} \right] dx \quad (2.27)$$

Las integrales indicadas se calculan en el apéndice C, en términos de la integral $I_{m,n}(\beta)$ resulta

$$E(\beta) = 2N^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left[\beta(\beta - 1)a^\beta I_{\beta-2,3}(\beta) - 2\beta^2 a^{2\beta} I_{2\beta-2,4}(\beta) \right] + N^2 m\omega^2 I_{2,2}(\beta) \quad (2.28)$$

con el resultado (C.4) queda

$$E(\beta) = N^2 \frac{\hbar^2}{m} \left[(\beta - 1)a \frac{\Gamma\left(1 - \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma(3)} - 2\beta a \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma(4)} \right] \\ + N^2 m\omega^2 \frac{1}{\beta a^3} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma(2)}$$

Simplificando las funciones gama y sustituyendo la constante de normalización, con la ecuación (2.22), obtenemos

$$E(\beta) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[\frac{1}{6} \beta^2 \frac{\Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)} + \frac{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} \right] \quad (2.29)$$

La gráfica de la energía como función del parámetro β se presenta en la Figura 2.3.

De la figura se ve que existe un valor del parámetro β para el cual la energía es mínima, dicho valor se encuentra buscando el mínimo de la función $E(\beta)$, lo cual se calcula numéricamente, el valor óptimo de β es

$$\beta_m = 2.946379, \quad (2.30)$$

por lo tanto, la mejor aproximación a la energía del estado base del oscilador la obtenemos sustituyendo β_m en la expresión (2.29), resulta

$$E_m = 1.079769 \left(\frac{1}{2} \hbar\omega \right). \quad (2.31)$$

Como sabemos, el valor real de la energía del estado base del oscilador armónico está dada por (2.19), de aquí podemos confirmar que la energía obtenida (2.31) constituye, como era de esperarse, una cota superior y una buena aproximación a la energía del estado base, en caso de que no se conociera el valor exacto.

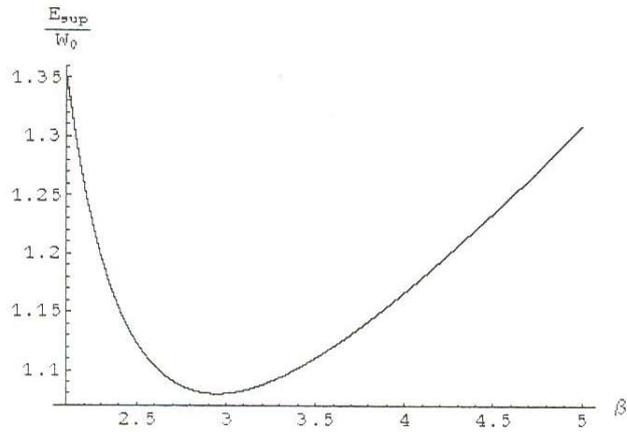


Figura 2.3: Gráfica de la energía como función del parámetro β

2.1.2 Átomo de hidrógeno

A continuación, ilustraremos el método variacional haciendo una estimación de la energía del estado base del átomo de hidrógeno, el cual es de suma importancia en la Física.

El operador hamiltoniano del átomo de hidrógeno es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}, \quad (2.32)$$

donde e es la magnitud de la carga eléctrica del electrón. El estado base es un estado de momento angular cero, por ello el operador laplaciano se reduce al operador radial

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (2.33)$$

Proponemos como función de prueba la siguiente familia de funciones parametrizadas por β :

$$\phi(r, \beta) = N e^{-\beta ar} \quad (2.34)$$

donde N es la constante de normalización y a es una constante fija que tiene dimensiones del inverso de la distancia. Mediante las constantes del

problema, m , \hbar y e , es fácil determinar que a está dada por

$$a = \frac{me^2}{\hbar^2} \quad (2.35)$$

es decir, a es el inverso del radio de Bohr.

La constante de normalización la calculamos elevando al cuadrado la función de onda (2.34), multiplicando por el elemento de volumen, $d^3x = 4\pi r^2 dr$, e integrando de cero a infinito con respecto a la variable radial, el resultado es

$$N = \left(\frac{a^3 \beta^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.36)$$

Aplicando el operador hamiltoniano (2.32) a nuestra función de prueba nos queda

$$\hat{H}\phi = -\frac{N\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2a}{r}\beta + a^2\beta^2 \right) e^{-\beta ar} - N \frac{e^2}{r} e^{-\beta ar}. \quad (2.37)$$

multiplicando esta expresión por ϕ^* , multiplicando por el elemento de volumen e integrando de cero a infinito con respecto a r , obtenemos la energía $E(\beta)$ en la forma

$$E(\beta) = \pi N^2 \left(\frac{\hbar^2}{2ma\beta} - \frac{e^2}{a^2\beta^2} \right),$$

sustituyendo la constante de normalización, ecuación (2.36), junto con el valor de la constante a , ecuación (2.35), queda

$$E(\beta) = \frac{me^4}{2\hbar^2} (\beta^2 - 2\beta) \quad (2.38)$$

cuya gráfica se presenta en la Figura 2.4

El mínimo de la curva de la Figura 2.4 se encuentra en $\beta_m = 1$, para este valor del parámetro obtenemos la mejor predicción con la familia de funciones (2.34); en particular, la energía está dada por

$$E_m = -\frac{me^4}{2\hbar^2}, \quad (2.39)$$

y la función de onda para la cual se obtiene este resultado es

$$\phi_m(r) = \left(\frac{a^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-ar}, \quad (2.40)$$

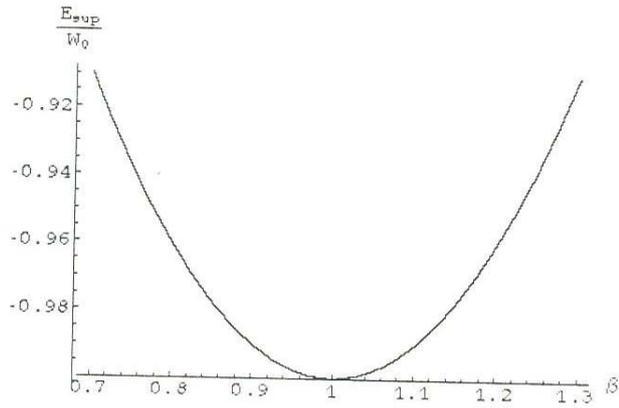


Figura 2.4: Gráfica de la energía como función del parámetro β .

con la constante a dada por (2.35). La expresión (2.39) coincide con el valor exacto de la energía del estado base y, por lo tanto, (2.40) es la función de onda exacta.

2.2 Método variacional generalizado

En esta sección presentaremos una versión ligeramente modificada del método variacional presentado en la sección anterior; esta variante tiene la ventaja de que con ella podemos encontrar también cotas inferiores al eigenvalor del estado base de la energía.

Nuestro punto de partida es el siguiente: Sea $f(x)$ una función suave, es decir, una función continua con derivadas continuas; la función se puede expresar en términos de un desarrollo en potencias de la variable x en la forma:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j x^j,$$

donde f_j son los coeficientes constantes del desarrollo.

Ahora construimos el operador $f(\hat{H})$ sustituyendo en el desarrollo anterior

la variable x por el operador \hat{H} para tener

$$f(\hat{H}) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j \hat{H}^j, \quad (2.41)$$

con \hat{H} el operador hamiltoniano.

Cuando aplicamos el operador $f(\hat{H})$ a una eigenfunción de \hat{H} tenemos

$$\begin{aligned} f(\hat{H})\psi_n &= \sum_{j=0}^{\infty} f_j \hat{H}^j \psi_n \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} f_j W_n^j \psi_n \\ &= f(W_n)\psi_n \end{aligned} \quad (2.42)$$

es decir, ψ_n es eigenfunción del operador $f(\hat{H})$ con eigenvalor $f(W_n)$.

Sea $\{\phi(x, \beta)\}$ una familia de funciones de prueba normalizadas y parametrizadas por β . Cuando aplicamos $f(\hat{H})$ a la función de prueba $\phi(x, \beta)$, la cual, por supuesto, cumple con las condiciones en la frontera del sistema en consideración, tenemos

$$\begin{aligned} f(\hat{H})\phi &= \sum_n a_n f(\hat{H})\psi_n \\ &= \sum_n a_n f(W_n)\psi_n, \end{aligned} \quad (2.43)$$

donde hemos usado el desarrollo de la función ϕ en términos del conjunto completo de eigenfunciones normalizadas y ortogonales $\{\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots\}$ del hamiltoniano \hat{H} , ecuación (2.5). Multiplicando la expresión anterior por $\phi^*(x, \beta)$ e integrando, nos queda

$$\int \phi^* f(\hat{H})\phi dx = \sum_n |a_n|^2 f(W_n). \quad (2.44)$$

Sumando y restando $f(W_0)$ al lado derecho de la expresión anterior, podemos escribir

$$\int \phi^* f(\hat{H})\phi dx = f(W_0) + \sum_n |a_n|^2 [f(W_n) - f(W_0)] \quad (2.45)$$

ya que, como ϕ está normalizada, se cumple: $\sum_n |a_n|^2 = 1$.

Supongamos ahora que $f(x)$ es una función monótona creciente, entonces se asegura que, siempre que $W_n > W_m$, se cumplirá

$$f(W_n) > f(W_m).$$

Con esto el segundo término del lado derecho de (2.45) es positivo o cero y por lo tanto concluimos que se cumple

$$\int \phi^* f(\hat{H}) \phi dx \geq f(W_0) \quad (2.46)$$

este resultado generaliza el obtenido con el método variacional tradicional, ecuación (2.9) y se reduce a él cuando $f(\hat{H})$ es \hat{H} .

El signo igual de la expresión anterior se realiza en el caso particular en que la función de prueba $\phi(x)$ coincide con la función de onda exacta del estado base, en cuyo caso todos los coeficientes del desarrollo (2.5) son cero excepto a_0 que es igual a uno.

Ahora construimos un operador de la forma

$$f(\hat{H} - E) = \sum_j f_j (\hat{H} - E)^j, \quad (2.47)$$

donde E es la energía calculada con la función de prueba, es decir

$$E(\beta) = \int \phi(x, \beta) \hat{H} \phi(x, \beta) dx. \quad (2.48)$$

Aplicando el operador (2.47) a la eigenfunción ψ_n obtenemos

$$f(\hat{H} - E)\psi_n = f(W_n - E)\psi_n \quad (2.49)$$

por lo tanto, ψ_n es también eigenfunción del operador $f(\hat{H} - E)$ con eigenvalor $f(W_n - E)$.

Si aplicamos el operador (2.47) a la función de prueba $\phi(x, \beta)$, multiplicamos por la función $\phi^*(x, \beta)$ e integramos queda

$$\int \phi^* f(\hat{H} - E) \phi dx = \sum_n |a_n|^2 f(W_n - E). \quad (2.50)$$

Como en el caso anterior, si $f(x)$ es una función monótona creciente, lo cual significa que siempre que $W_n > W_m$ se cumple

$$f(W_n - E) > f(W_m - E), \quad (2.51)$$

entonces, de la ecuación (2.50), se sigue la desigualdad

$$\int \phi^* f(\hat{H} - E) \phi dx \geq f(W_0 - E), \quad (2.52)$$

donde, de nuevo, el signo igual ocurre cuando la función de prueba coincide con la función de onda exacta.

2.3 Cota inferior al estado base

Aunque la teoría anterior es aplicable a cualquier función monótona creciente es interesante y útil aplicarla al caso en que la función es

$$f(x) = x^2. \quad (2.53)$$

En este caso, si denotamos con Δ^2 a la cantidad

$$\Delta^2 = \int \phi^*(x, \beta) (\hat{H} - E)^2 \phi(x, \beta) dx,$$

la cual es una función del parámetro β . Cuando desarrollamos el binomio e integramos término a término, se reduce a

$$\Delta^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - E^2, \quad (2.54)$$

donde hemos definido

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int \phi^*(x, \beta) \hat{H}^2 \phi(x, \beta) dx, \quad (2.55)$$

entonces, para este caso, la ecuación (2.50) se escribe en la forma

$$\Delta^2 = \sum_n |a_n|^2 (W_n - E)^2.$$

Ahora asumimos que la energía E está más cerca del estado base que de cualquier otro nivel de energía y por lo tanto se cumple

$$(W_n - E)^2 \geq (W_0 - E)^2$$

para toda n , lo cual nos lleva a la desigualdad

$$\Delta^2 \geq (W_0 - E)^2. \quad (2.56)$$

Escribiendo ambos términos de la desigualdad anterior en el lado izquierdo y descomponiendo en factores queda

$$(\Delta - W_0 + E)(\Delta + W_0 - E) \geq 0,$$

donde Δ es la raíz cuadrada positiva del lado derecho de (2.54).

Como Δ es positivo y E es una cota superior para W_0 el primer factor es positivo y se puede suprimir sin alterar la dirección de la desigualdad

$$(\Delta + W_0 - E) \geq 0,$$

es decir

$$W_0 \geq E - \Delta \tag{2.57}$$

y hemos encontrado que $E - \Delta$ es una cota inferior a la energía del estado base. De esta manera, dada una familia de funciones prueba, la energía del estado base se encuentra acotada por

$$E - \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - E^2} \leq W_0 \leq E \tag{2.58}$$

donde E y $\langle \hat{H}^2 \rangle$ están dadas por las ecuaciones (2.48) y (2.55), respectivamente.

La aplicación de este método a problemas usuales es más difícil que la aplicación del método variacional tradicional ya que, además de E , es necesario calcular $\langle \hat{H}^2 \rangle$, lo cual ordinariamente es considerado más difícil que el cálculo de la energía E .

Es necesario notar que variando los parámetros en la familia de funciones prueba, de tal manera que Δ sea mínimo, la función ϕ se acerca a la función de onda correcta ψ_0 , tanto como es permitido por la forma de ϕ . En consecuencia, este método puede ser considerado como una variante del método variacional aplicable al estado base del sistema, que alcanza una nueva predicción a W_0 en el valor β_M que hace que $E - \Delta$ sea máximo. Es decir, la mejor predicción a la energía del estado base es

$$E_M = E(\beta_M) - \Delta(\beta_M). \tag{2.59}$$

De esta manera mediante el método variacional obtenemos dos aproximaciones a la energía del estado base, E_M y E_m , la primera como cota inferior y

la segunda como cota superior, de modo que el valor exacto W_0 queda entre estos dos valores

$$E_M \leq W_0 \leq E_m. \quad (2.60)$$

asociados a los valores E_M y E_m están las funciones de prueba $\phi(x, \beta_M)$ y $\phi(x, \beta_m)$, respectivamente.

También notamos que si existe un valor del parámetro, digamos β_0 , que hace que $\Delta(\beta_0) = 0$, entonces la cota superior y la cota inferior coinciden y son iguales a la energía del estado base

$$W_0 = E(\beta_0) \quad (2.61)$$

y la función $\phi(x, \beta_0)$ coincide con la función de onda exacta del estado base. Es decir, esta variante del método variacional nos ofrece un criterio práctico para determinar cuándo nuestra predicción coincide con el valor exacto.

A continuación aplicaremos este método a los dos problemas revisados en la sección anterior.

2.3.1 Oscilador armónico

En esta subsección nos proponemos calcular la cota inferior de la energía del estado base del oscilador armónico usando la misma familia de funciones de prueba dependiente de un parámetro, ecuación (2.12),

$$\phi(x, \beta) = N e^{-\beta a^2 x^2}, \quad (2.62)$$

donde a es el parámetro fijo dado por (2.13) y la constante de normalización (2.14).

De los resultado de la teoría del método variacional generalizado tenemos que la cota inferior a la energía del estado base es

$$E - \Delta \leq W_0, \quad (2.63)$$

donde E está dado por (2.48) y Δ es la relación

$$\Delta = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - E^2}. \quad (2.64)$$

Por lo tanto, la integral que tenemos que calcular es

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int \phi^*(x, \beta) \hat{H}^2 \phi(x, \beta) dx$$

y debido a que el hamiltoniano es un operador hermitiano, la integral la podemos escribir de la siguiente forma

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int (\hat{H}\phi)^2 dx. \quad (2.65)$$

De esta manera, sustituyendo el resultado (2.15) obtenemos

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = 2N^2 \int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (4\beta^2 a^4 x^2 - 2\beta a^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right]^2 e^{-2\beta a^2 x^2} dx \quad (2.66)$$

donde el factor dos aparece al cambiar la integral sobre toda la recta por el doble de la integral de cero a infinito. Desarrollando el cuadrado, llevando a cabo las integrales indicadas y sustituyendo la constante de normalización, ecuación (2.14), resulta

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{3\hbar^4 \beta^2 a^4}{4m^2} + \frac{3m^2 \omega^4}{64\beta^2 a^4} - \frac{1}{8} \hbar^2 \omega^2, \quad (2.67)$$

y sustituyendo el valor de a , de la expresión (2.13), queda

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \left(3\beta^2 + \frac{3}{16\beta^2} - \frac{1}{2} \right). \quad (2.68)$$

Con este resultado y con la expresión para la energía E , ecuación (2.17), calculamos Δ^2 ,

$$\Delta^2(\beta) = \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \left(2\beta^2 + \frac{1}{8\beta^2} - 1 \right). \quad (2.69)$$

Por lo tanto, la cota inferior a la energía del estado base, como función del parámetro β , la obtenemos sustituyendo estas cantidades en $E_{\text{inf}} = E - \Delta$, obtenemos

$$E_{\text{inf}}(\beta) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\frac{1}{4\beta} + \beta - \sqrt{2\beta^2 + \frac{1}{8\beta^2} - 1} \right] \quad (2.70)$$

En la Figura 2.5 hemos graficado la energía E_{inf} como función de β . De la gráfica de E_{inf} vemos que hay un valor del parámetro β para el cual (2.70) es máxima. Mediante el proceso de maximización, encontramos el valor de β_M

$$\beta_M = \frac{1}{2}. \quad (2.71)$$

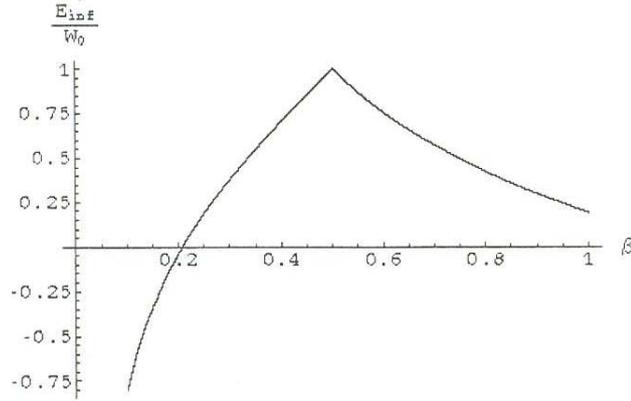


Figura 2.5: Cota inferior a la energía del estado base del oscilador como función del parámetro β .

Ahora evaluamos $\Delta^2(\beta)$ en el valor de β_M y resulta

$$\Delta^2(\beta_M) = 0, \quad (2.72)$$

es decir, la cota inferior y la cota superior coinciden cuando $\beta = \frac{1}{2}$ y hemos obtenido el valor exacto de la energía del estado base del oscilador armónico. Esto se ilustra gráficamente en la Figura 2.6.

Con este resultado, hemos demostrado que la familia de funciones de prueba (2.62) contiene la función de onda exacta para el estado base del oscilador armónico, para el caso $\beta = \frac{1}{2}$, es decir

$$\phi\left(x, \frac{1}{2}\right) = N e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2}. \quad (2.73)$$

2.3.2 Cota inferior a la energía del estado base del oscilador

A continuación, calcularemos la cota inferior de la energía del estado base para el oscilador armónico unidimensional usando la familia de funciones de prueba (2.21), la cual, como ya se dijo, no contiene a la función de onda exacta, esto es usaremos las funciones

$$\phi(x, \beta) = \frac{N}{1 + |ax|^\beta}$$

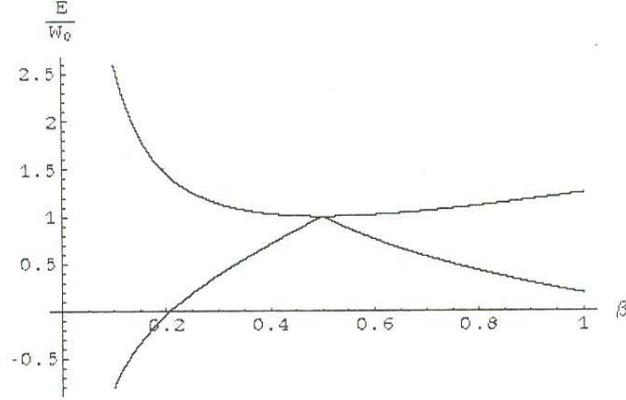


Figura 2.6: Cota superior y cota inferior a la energía del estado base del oscilador como función de β . Las dos curvas se tocan en un punto para el valor de $\beta = \frac{1}{2}$.

con las constantes a y N dadas por (2.13) y (2.22), respectivamente.

Para calcular la cota inferior es necesario determinar la cantidad

$$\Delta = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - E^2}$$

donde $E(\beta)$ está dada por (2.29). Nos falta calcular $\langle \hat{H}^2 \rangle$ la cual, como vimos, es equivalente a la integral del cuadrado de $\hat{H}\phi$.

Usando el resultado (2.26), elevando al cuadrado e integrando dos veces de cero a infinito, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = & 2N^2 \int_0^\infty \left[\frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{\beta^2(\beta-1)^2 a^{2\beta}}{(1+a^\beta x^\beta)^4} x^{2(\beta-2)} + \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{4\beta^4 a^{4\beta}}{(1+a^\beta x^\beta)^6} x^{4(\beta-1)} \right. \\ & + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 \frac{x^4}{(1+a^\beta x^\beta)^2} - \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{4\beta^3(\beta-1)a^{3\beta}}{(1+a^\beta x^\beta)^3} x^{3\beta-4} \\ & \left. + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{2\beta(\beta-1)a^\beta}{(1+a^\beta x^\beta)^3} x^\beta - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{4\beta^2 a^{2\beta}}{(1+a^\beta x^\beta)^4} x^{2\beta} \right] dx \end{aligned} \quad (2.74)$$

estas integrales se calculan en el apéndice C. En términos de la integral

$I_{m,n}(\beta)$, ecuación (C.1) del apéndice C, resulta

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = 2N^2 \left[\frac{\hbar^4}{4m^2} \beta^2 (\beta - 1)^2 a^{2\beta} I_{2\beta-4} + \frac{\hbar^4 \beta^4 a^{4\beta}}{m^2} I_{4\beta-4,6} + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 I_{4,2} \right. \\ \left. - \frac{\hbar^4 \beta^3 (\beta - 1) a^{3\beta}}{m^2} I_{3\beta-4,5} + \frac{\hbar^2 \beta (\beta - 1) a^\beta}{2} I_{\beta,3} - \hbar^2 \omega^2 \beta^2 a^{2\beta} I_{2\beta,4} \right]$$

Con el resultado (C.4) queda

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = 2N^2 \left[\frac{\hbar^4}{4m^2} \beta (\beta - 1)^2 a^3 \frac{\Gamma(2 - \frac{3}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{3}{\beta})}{\Gamma(4)} + \frac{m^2 \omega^4 \Gamma(\frac{5}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{5}{\beta})}{4a^5 \Gamma(2)} \right. \\ + \frac{\hbar^4 \beta^3 a^3 \Gamma(4 - \frac{3}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{3}{\beta})}{m^2 \Gamma(6)} - \frac{\hbar^4 \beta^2 (\beta - 1) a^3 \Gamma(3 - \frac{3}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{3}{\beta})}{m^2 \Gamma(5)} \\ + \frac{\hbar^2 \omega^2 (\beta - 1) \Gamma(1 + \frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})}{2a \Gamma(3)} \\ \left. - \frac{\hbar^2 \omega^2 (\beta - 1) \Gamma(2 + \frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})}{2a \Gamma(5)} \right].$$

Simplificando las funciones gama, sustituyendo el valor de la constante de normalización, que está dada por (2.22), y sustituyendo el valor de la constante a , dada por (2.13), resulta

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \left[\frac{1}{30} \beta^2 (\beta^2 - 1) \frac{\Gamma(2 - \frac{3}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{3}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})} + \frac{\Gamma(\frac{5}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{5}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})} \right. \\ \left. + \frac{1}{3} \beta (\beta - 5) \frac{\Gamma(1 + \frac{1}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta})} \right]. \quad (2.75)$$

Con la expresión anterior y con ayuda de $E(\beta)$, dada por (2.17), calculamos $\Delta^2(\beta)$,

$$\Delta^2(\beta) = \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \left[\frac{1}{30} \beta^2 (\beta^2 - 1) \frac{\Gamma(2 - \frac{3}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{3}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})} - \frac{1}{36} \beta^4 \frac{\Gamma^2(2 + \frac{1}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{1}{\beta})} \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(\frac{5}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{5}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{1}{\beta})} - \frac{\Gamma^2(\frac{3}{\beta}) \Gamma^2(2 - \frac{3}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{1}{\beta}) \Gamma^2(2 - \frac{1}{\beta})} + \frac{1}{3} \beta (\beta - 5) \frac{\Gamma(1 + \frac{1}{\beta})}{\Gamma(\frac{1}{\beta})} \right]$$

$$\left. -\frac{1}{3}\beta^2 \frac{\Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} \right]. \quad (2.76)$$

La cota inferior a la energía del estado base del oscilador es la función

$$\begin{aligned} E_{\text{inf}}(\beta) = & \frac{1}{2}\hbar\omega \left\{ \frac{1}{6}\beta^2 \frac{\Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)} + \frac{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)\Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} - \right. \\ & - \left[\frac{1}{30}\beta^2(\beta^2 - 1) \frac{\Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 + \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} - \frac{1}{36}\beta^4 \frac{\Gamma^2\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{1}{\beta}\right)} \right. \\ & + \frac{\Gamma\left(\frac{5}{\beta}\right) \Gamma\left(2 + \frac{5}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} - \frac{\Gamma^2\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma^2\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma^2\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} + \frac{1}{3}\beta(\beta - 5) \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)} \\ & \left. \left. - \frac{1}{3}\beta^2 \frac{\Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (2.77) \end{aligned}$$

En la Figura 2.7 hemos graficado la función $E_{\text{inf}}(\beta)$ contra el parámetro β . De la figura se puede apreciar que existe un valor del parámetro β para el cual la función $E_{\text{inf}}(\beta)$ alcanza su máximo, éste es el valor β_M que calculamos numéricamente, resulta

$$\beta_M = 3.126425 \quad (2.78)$$

Sustituyendo este valor de β_M en la expresión para $E_{\text{inf}}(\beta)$ damos la mejor aproximación por abajo a W_0 , resulta

$$E_{\text{inf}}(\beta_M) = 0.0295736 \left(\frac{1}{2}\hbar\omega \right), \quad (2.79)$$

En consecuencia, reuniendo con este resultado el obtenido en la subsección 2.1.1, ecuación (2.31), concluimos que la familia de funciones (2.73) predice que la energía del estado base estará acotada por

$$0.0295736 \left(\frac{1}{2}\hbar\omega \right) \leq W_0 \leq 1.079769 \left(\frac{1}{2}\hbar\omega \right) \quad (2.80)$$

En la Figura 2.8 graficamos simultáneamente las curvas que forman la cota superior y la cota inferior a la energía W_0 como función del parámetro β , es de notar que el mínimo de la cota superior y el máximo de la cota inferior no ocurren en el mismo valor del parámetro.

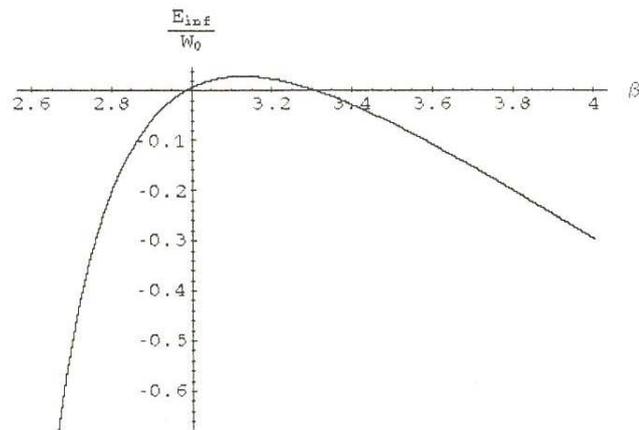


Figura 2.7: Cota inferior a la energía del estado base del oscilador con la familia de funciones (2.73) como función del parámetro β .

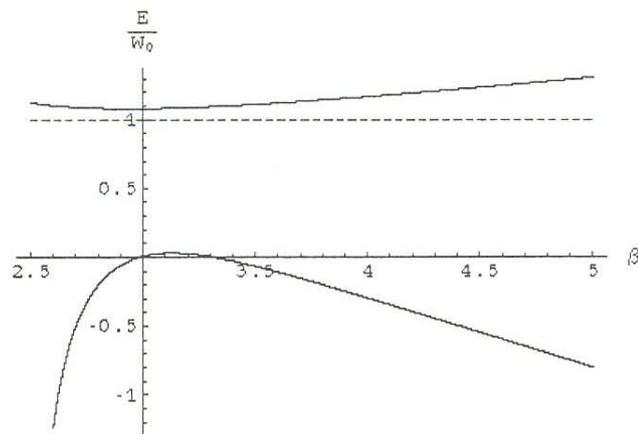


Figura 2.8: Cotas superior e inferior a la energía W_0 como función de β , la línea punteada representa el valor exacto.

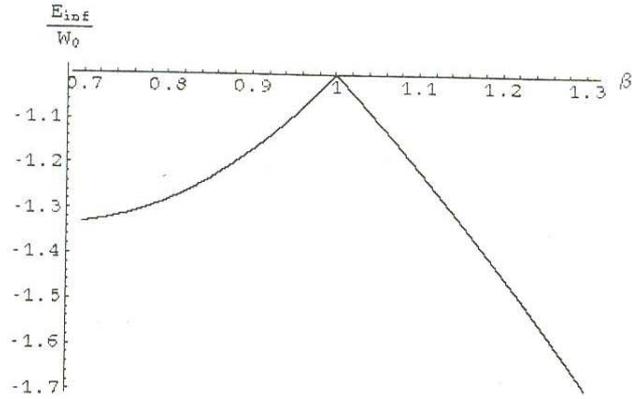


Figura 2.9: Cota inferior a la energía del estado base del átomo de hidrógeno. El máximo se localiza en $\beta_M = 1$.

2.3.3 Átomo de hidrógeno

De nueva cuenta, para ilustrar mejor la aplicación del método variacional generalizado, retomamos el problema del átomo de hidrógeno que se trató en la subsección 2.1.2. Ahora, calcularemos la cota inferior a la energía del estado base para dicho problema usando la misma familia de funciones de prueba normalizadas de la ecuación (2.34), esto es

$$\phi(r, \beta) = N e^{-\beta ar} \quad (2.81)$$

con a fijo y N la constante de normalización, dadas por (2.35) y (2.36), respectivamente.

Procediendo de manera similar al caso del oscilador de la subsección anterior, para obtener la cota inferior necesitamos calcular previamente la integral dada por (2.55). Para ello, usamos el resultado (2.37) para tener, después de desarrollar el cuadrado y sustituir en la integral,

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = 4\pi N^2 \int_0^\infty & \left[\frac{\hbar^4 \beta^2 a^2}{m^2} + \frac{\hbar^4 \beta^4 a^4}{4m^2} r^2 + e^4 - \frac{\hbar^4 \beta^3 a^3}{m^2} r - \frac{2\hbar^2 \beta a e^2}{m} \right. \\ & \left. + \frac{\hbar^2 \beta^2 a^2 e^2}{m} r \right] e^{-2\beta ar} dr, \end{aligned} \quad (2.82)$$

donde usamos el elemento de volumen $d^3x = 4\pi r^2 dr$.

Llevando a cabo las integrales indicadas y sustituyendo el valor de la constante de normalización (2.36), obtenemos

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{5 \hbar^4 \beta^4 a^4}{4 m^2} - \frac{3 \hbar^2 e^2 \beta^3 a^3}{m} + 2 e^4 \beta^2 a^2, \quad (2.83)$$

y sustituyendo el valor del parámetro a , ecuación (2.35), queda finalmente

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{m^2 e^8}{4 \hbar^4} (5\beta^4 - 12\beta^3 + 8\beta^2). \quad (2.84)$$

Para calcular Δ , sustituimos el resultado anterior junto con la expresión para $E(\beta)$, ecuación (2.38), en la ecuación (2.64)

$$\Delta(\beta) = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \sqrt{4\beta^4 - 8\beta^3 + 4\beta^2} \quad (2.85)$$

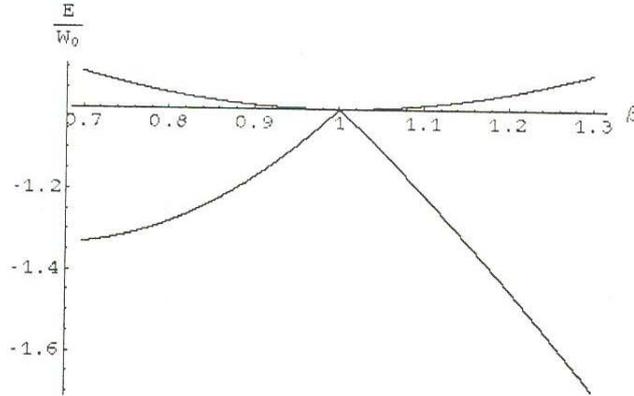


Figura 2.10: Cotas superior e inferior a la energía del estado base del átomo de hidrógeno construidas con la familia de funciones (2.81).

Por lo tanto, la cota inferior a la energía del estado base del átomo de hidrógeno, calculada con la familia de funciones (2.81), está dada por

$$E_{\text{inf}}(\beta) = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \left[\beta^2 - 2\beta - \sqrt{4\beta^4 - 8\beta^3 + 4\beta^2} \right] \quad (2.86)$$

3. Aplicación del método variacional al rebotador cuántico

En este capítulo nos proponemos buscar cotas superior e inferior para la energía del estado base de la partícula dentro de un campo uniforme. Para esto, usaremos tres familias de funciones de prueba distintas, a las cuales se les tratará de la manera antes vista. Dichas funciones cumplen con las condiciones en la frontera establecidas, es decir se anulan en el origen y caen a cero al infinito. El hamiltoniano para este sistema es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V(y), \quad (3.1)$$

donde el potencial $V(y)$, está dado en (1.1)

$$V(y) = \begin{cases} \mathcal{E}y & y > 0 \\ \infty & y \leq 0 \end{cases}.$$

3.1 Función de prueba tipo exponencial

Aquí usaremos la siguiente familia de funciones de prueba dependientes de un parámetro

$$\phi(y, \beta) = Nye^{-\beta \frac{1}{a}y}, \quad (3.2)$$

donde a es un parámetro fijo que tiene dimensiones de distancia y β es un parámetro adimensional. El parámetro a está dado por la ecuación (1.15), esto es

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.3)$$

La función (3.2) cumple las condiciones en la frontera del problema y la constante de normalización es obtenida mediante el proceso de integración, resulta

$$N = 2 \left(\frac{\beta}{a} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (3.4)$$

Empezaremos primero por calcular la cota superior para la energía del estado base, ya que como se vio en los ejemplos anteriores su cálculo es de mayor facilidad, además de que será usada en el cálculo de la cota inferior.

Aplicando el operador hamiltoniano, \hat{H} , a nuestra función de prueba, obtenemos

$$\hat{H}\phi = \frac{N\hbar^2}{2m} \left(2\beta\frac{1}{a} - \beta^2\frac{1}{a^2}y \right) e^{-\beta\frac{1}{a}y} + N\mathcal{E}y^2 e^{-\beta\frac{1}{a}y}, \quad (3.5)$$

A partir de esta expresión calculamos la energía $E(\beta)$, ecuación (2.48), multiplicando $\hat{H}\phi$ por $\phi^*(y, \beta)$ e integrando, para tener

$$E(\beta) = N^2 \int_0^\infty ye^{-2\beta\frac{1}{a}y} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(2\beta\frac{1}{a} - \beta^2\frac{1}{a^2}y \right) + \mathcal{E}y^2 \right] dy,$$

llevando a cabo las integrales indicadas y sustituyendo el valor de la constante de normalización, obtenemos

$$E(\beta) = \frac{\hbar^2\beta^2}{2ma^2} + \frac{3\mathcal{E}a}{2\beta}, \quad (3.6)$$

usando el valor de a , de la expresión (3.3), queda

$$E(\beta) = \mathcal{E}a \left(\beta^2 + \frac{3}{2\beta} \right) \quad (3.7)$$

cuya gráfica se muestra en la Figura 3.1.

De la gráfica se ve que existe un valor del parámetro β para el cual $E(\beta)$ es mínimo; mediante el procedimiento conocido de minimización obtenemos el valor de β que nos da la mínima de las cotas superiores calculadas con esta familia de funciones

$$\beta_m = \sqrt[3]{\frac{3}{4}} \cong 0.90856. \quad (3.8)$$

Así, la mejor aproximación a la energía del estado base de la partícula dentro de un campo uniforme la obtenemos al sustituir β_m en (3.7)

$$E(\beta_m) = 2.47645 \mathcal{E}a. \quad (3.9)$$

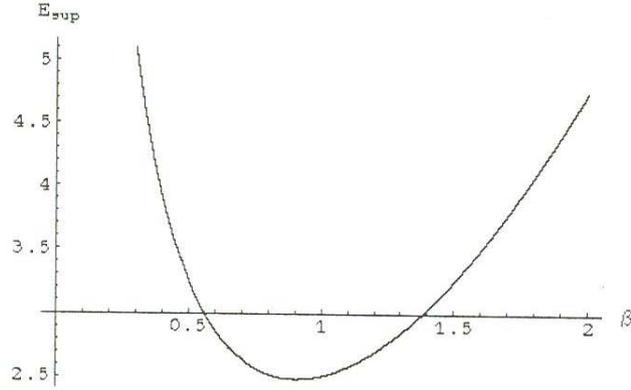


Figura 3.1: Gráfica de la energía como función del parámetro β

Como vimos en el primer capítulo, de la tabla de los ceros de la función de Airy se sigue que el valor exacto de la energía del estado base es $W_0 = 2.338107 \mathcal{E}a$, por lo que como era de esperarse hemos obtenido una cota superior.

Ahora procedemos a calcular la cota inferior para la energía del estado base del sistema usando la misma familia de funciones de prueba indicada en (3.2).

Tenemos que la cota inferior cumple la fórmula (2.57) del capítulo anterior

$$W_0 \geq E - \Delta, \quad (3.10)$$

donde E está dado por (3.7) y Δ es la relación

$$\Delta = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - E^2}. \quad (3.11)$$

Para calcular la cantidad $\langle \hat{H}^2 \rangle$, usamos el resultado (3.5) el cual se obtiene al aplicar el operador hamiltoniano a nuestra función de prueba; así, elevando al cuadrado este resultado y sustituyendo en (2.65), resulta

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 \int_0^\infty & \left[\frac{\hbar^4 \beta^2}{m^2 a^2} + \frac{\hbar^4 \beta^4}{4m^2 a^4} y^2 + \mathcal{E} y^4 - \frac{\hbar^4 \beta^3}{m^2 a^3} y + \frac{2\hbar^2 \beta \mathcal{E}}{ma} y^2 \right. \\ & \left. - \frac{\hbar^2 \beta^2 \mathcal{E}}{ma^2} y^3 \right] e^{-2\beta \frac{1}{a} y} dy, \end{aligned}$$

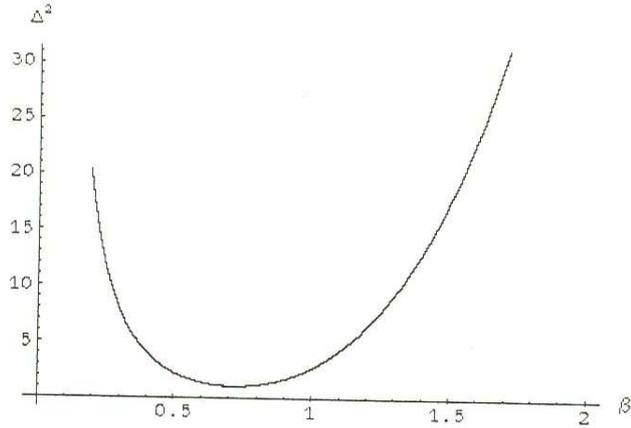


Figura 3.2: Gráfica de Δ^2 como función del parámetro β

y llevando a cabo las integrales indicadas, sustituyendo el valor de la constante de normalización dada por (3.4) obtenemos

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{5 \hbar^4 \beta^4}{4 m^2 a^4} + \frac{\hbar^2 \beta \mathcal{E}}{2 m a} + \frac{3 \mathcal{E}^2 a^2}{\beta^2} \quad (3.12)$$

y después de hacer uso del valor del parámetro a , resulta

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \mathcal{E}^2 a^2 \left(5\beta^4 + \beta + \frac{3}{\beta^2} \right). \quad (3.13)$$

Usando este resultado y (3.7), procedemos a calcular Δ^2 dada por la relación (3.11), obteniendo así

$$\Delta^2(\beta) = \mathcal{E}^2 a^2 \left(4\beta^4 - 2\beta + \frac{3}{4\beta^2} \right), \quad (3.14)$$

cuya gráfica se muestra en la Figura 3.2.

Con el resultado anterior la cota inferior a la energía como función del parámetro β es

$$W_0 \geq \mathcal{E} a \left[\left(\beta^2 + \frac{3}{2\beta} \right) - \sqrt{4\beta^4 - 2\beta + \frac{3}{4\beta^2}} \right] \quad (3.15)$$

En este caso, la gráfica de la cota inferior a la energía no tiene un máximo, sin embargo, de la Figura 3.2 es claro que existe un valor del parámetro β para el cual $\Delta(\beta)$ es mínima, dicho valor lo encontramos minimizando $\Delta(\beta)$, y obtenemos

$$\beta_M = 0.721125 \quad (3.16)$$

Finalmente para obtener la cota inferior de la energía del estado base, sustituimos β_M en las expresiones (3.7) y (3.14), para tener

$$W_0 \geq 1.56006 \mathcal{E}a \quad (3.17)$$

Por lo tanto, tenemos que la mejor predicción para la energía del estado base de la partícula dentro de un campo uniforme estará acotada por

$$1.56006 \mathcal{E}a \leq W_0 \leq 2.47645 \mathcal{E}a. \quad (3.18)$$

3.2 Función de prueba tipo gaussiana

En este caso, utilizaremos una familia de funciones de prueba similar a la usada en el caso anterior, la diferencia de esta familia es que la potencia de la variable y en la exponencial es un parámetro

$$\phi(y, \beta) = Nye^{-a^{-\beta}y^\beta}, \quad (3.19)$$

donde nuevamente a es una constante fija que tiene dimensiones de distancia y β es un parámetro adimensional, el parámetro a es el indicado en la ecuación (3.3).

Ahora la constante de normalización de la función de prueba está dada por

$$N^2 = \frac{2^{\frac{3}{\beta}}\beta}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)a^3}. \quad (3.20)$$

De igual manera que en el caso anterior, empezaremos por calcular la cota superior para la energía del estado base. Para ello, aplicamos el hamiltoniano \hat{H} dado en (3.1) a nuestra nueva función de prueba, obtenemos

$$\hat{H}\phi = N \left[\frac{\hbar^2}{2ma^\beta} \beta(\beta+1)y^{\beta-1} - \frac{\hbar^2}{2ma^{2\beta}} \beta^2 y^{2\beta-1} + \mathcal{E}y^2 \right] e^{-a^{-\beta}y^\beta}, \quad (3.21)$$

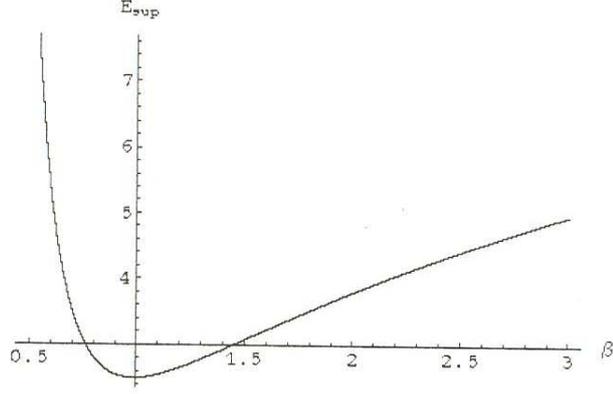


Figura 3.3: Gráfica de la energía como función del parámetro β

multiplicando esta expresión por $\phi^*(y, \beta)$ y sustituyendo en la ecuación (2.48), para el cálculo de la energía $E(\beta)$, queda

$$E(\beta) = N^2 \int_0^\infty y e^{-2a^{-\beta} y^\beta} \left[\frac{\hbar^2}{2ma^\beta} \beta(\beta + 1) y^{\beta-1} - \frac{\hbar^2}{2ma^{2\beta}} \beta^2 y^{2\beta-1} + \mathcal{E} y^2 \right] dy.$$

Usando la definición de la función gama llevamos a cabo las integrales indicadas, resulta

$$E(\beta) = \frac{N^2 \hbar^2 a}{2^{\frac{2}{\beta}+2} m} \left[(\beta + 1) \Gamma\left(\frac{1}{\beta} + 1\right) - \frac{1}{2} \beta \Gamma\left(\frac{1}{\beta} + 1\right) \right] + \frac{N^2 \mathcal{E} a^4}{2^{\frac{4}{\beta}}} \frac{1}{\beta} \Gamma\left(\frac{4}{\beta}\right)$$

sustituyendo el valor de la constante de normalización, ecuación (3.20), junto con el valor del parámetro a , dado por (3.3), y realizando las operaciones, queda

$$E(\beta) = \mathcal{E} a \left[2^{\frac{2}{\beta}-2} (\beta + 1) \frac{\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} + \frac{1}{2^{\frac{1}{\beta}}} \frac{\Gamma\left(\frac{4}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} \right]. \quad (3.22)$$

En la Figura 3.3 se muestra la gráfica de $E(\beta)$, en ella podemos ver que para cierto valor del parámetro β la energía E tendrá un mínimo. Dicho valor lo encontramos, como se ha venido haciendo en los casos anteriores, derivando la

función, igualando a cero y resolviendo numéricamente la ecuación resultante, así obtenemos

$$\beta_m = 0.98871. \quad (3.23)$$

Al sustituir este valor del parámetro en la expresión para la energía E , ecuación (3.22), encontramos la cota superior para la energía del estado base

$$E(\beta_m) = 2.49934 \mathcal{E}a. \quad (3.24)$$

Ahora nos proponemos calcular la cota inferior. Para ello usamos el resultado (3.21) y sustituimos en la ecuación (2.55)

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 \int_0^\infty \left[\frac{\hbar^2}{2ma^\beta} \beta(\beta+1)y^{\beta-1} - \frac{\hbar^2}{2ma^{2\beta}} \beta^2 y^{2\beta-1} + \mathcal{E}y^2 \right]^2 e^{-2a^{-\beta}y^\beta} dy.$$

Desarrollando el cuadrado y realizando las integrales indicadas con ayuda de la función gama, queda

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 & \left[\frac{\hbar^4}{4m^2a} \frac{\beta(\beta+1)^2}{2^{2-\frac{1}{\beta}}} \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right) + \frac{\hbar^4}{4m^2a} \frac{\beta^3}{2^{4-\frac{1}{\beta}}} \Gamma\left(4 - \frac{1}{\beta}\right) \right. \\ & + \frac{\mathcal{E}^2 \Gamma\left(\frac{5}{\beta}\right) a^5}{2^{\frac{5}{\beta}} \beta} - \frac{\hbar^4}{2m^2a} \frac{\beta^2(\beta+1)}{2^{3-\frac{1}{\beta}}} \Gamma\left(3 - \frac{1}{\beta}\right) \\ & \left. + \frac{\hbar^2 \mathcal{E}(\beta+1)a^2}{m} \frac{1}{2^{1+\frac{2}{\beta}}} \Gamma\left(1 + \frac{2}{\beta}\right) - \frac{\hbar^2 \beta \mathcal{E} a^2}{m} \frac{1}{2^{2+\frac{2}{\beta}}} \Gamma\left(2 + \frac{2}{\beta}\right) \right] \quad (3.25) \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor de la constante de normalización dado por (3.20) y simplificando las funciones gama, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = & \frac{\hbar^4}{4m^2a^4} \frac{2^{\frac{4}{\beta}} \beta^2}{16} (2\beta^2 - \beta + 9) \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} + \frac{\mathcal{E}^2 \Gamma\left(\frac{5}{\beta}\right) a^2}{2^{\frac{2}{\beta}} \Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} \\ & + \frac{\hbar^2}{4ma} 2^{\frac{1}{\beta}} \beta^2 \mathcal{E} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{2}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)}. \quad (3.26) \end{aligned}$$

Al introducir el valor del parámetro a , obtenemos así

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = & \mathcal{E}^2 a^2 \left[2^{\frac{4}{\beta}-4} \beta^2 (2\beta^2 - \beta + 9) \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} + \frac{\Gamma\left(\frac{5}{\beta}\right)}{2^{\frac{2}{\beta}} \Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} \right. \\ & \left. + 2^{\frac{1}{\beta}-1} \beta^2 \frac{\Gamma\left(1 + \frac{2}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right)} \right]. \quad (3.27) \end{aligned}$$

De la expresión anterior y con (3.22), procedemos a calcular Δ dada por la ecuación (3.11)

$$\begin{aligned} \Delta^2(\beta) = \mathcal{E}^2 a^2 & \left\{ 2^{\frac{4}{\beta}-4} \left[\beta^2 (2\beta^2 - \beta + 9) \frac{\Gamma(2 - \frac{1}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - (\beta + 1)^2 \frac{\Gamma^2(\frac{1}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] \right. \\ & + \frac{1}{2^{\frac{2}{\beta}}} \left[\frac{\Gamma(\frac{5}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - \frac{\Gamma^2(\frac{4}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] \\ & \left. + 2^{\frac{1}{\beta}-1} \left[\beta^2 \frac{\Gamma(1 + \frac{2}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - \frac{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(\frac{4}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Así, la cota inferior para la energía del estado base como función del parámetro β , la obtenemos al sustituir (3.22) y (3.28) en (2.57).

$$\begin{aligned} E_{\text{inf}}(\beta) = \mathcal{E} a & \left[2^{\frac{2}{\beta}-2} (\beta + 1) \frac{\Gamma(\frac{1}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} + \frac{1}{2^{\frac{1}{\beta}}} \frac{\Gamma(\frac{4}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} \right] \\ & - \mathcal{E} a \left\{ 2^{\frac{4}{\beta}-4} \left[\beta^2 (2\beta^2 - \beta + 9) \frac{\Gamma(2 - \frac{1}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - (\beta + 1)^2 \frac{\Gamma^2(\frac{1}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2^{\frac{2}{\beta}}} \left[\frac{\Gamma(\frac{5}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - \frac{\Gamma^2(\frac{4}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] + 2^{\frac{1}{\beta}-1} \left[\beta^2 \frac{\Gamma(1 + \frac{2}{\beta})}{\Gamma(\frac{3}{\beta})} - \frac{\Gamma(\frac{1}{\beta}) \Gamma(\frac{4}{\beta})}{\Gamma^2(\frac{3}{\beta})} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

En la Figura 3.4 se muestra la gráfica de $E_{\text{inf}}(\beta)$, donde claramente se ve que para cierto valor del parámetro β esta función alcanza un máximo, por lo tanto, derivando $E_{\text{inf}}(\beta)$ e igualando a cero encontramos el valor de β_M donde se encuentra el máximo

$$\beta_M = 2.344395 \quad (3.30)$$

Finalmente para obtener la mejor aproximación por abajo a la energía del estado base sustituimos (3.30) en la relación (3.10) para obtener

$$W_0 \geq 1.75195 \mathcal{E} a. \quad (3.31)$$

De nuevo, como sabemos la energía del estado base es $W_0 = 2.338107 \mathcal{E} a$, por lo que de nuestro resultado es claro que se trata de una cota inferior.

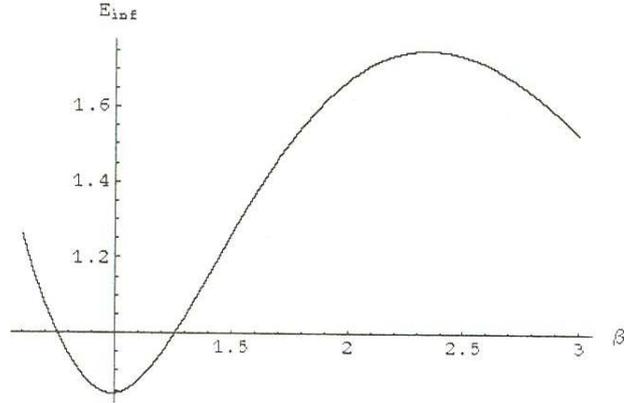


Figura 3.4: Gráfica de la cota inferior como función del parámetro β

Así, finalmente la energía del estado base de la partícula dentro de un campo uniforme estará acotada por

$$1.75195 \mathcal{E}a \leq W_0 \leq 2.49934 \mathcal{E}a \quad (3.32)$$

3.3 Función de prueba tipo lorentziana

A continuación, en este tercer caso, calcularemos de nuevo las cotas superior e inferior para el mismo sistema en discusión y se hará uso de una familia de funciones dependientes de un parámetro distinta a las antes vistas:

$$\phi(y, \beta) = N \frac{y}{1 + a^{-\beta} y^{\beta}} \quad (3.33)$$

donde a es de nuevo la constante fija con dimensiones de longitud dada por (3.3), N la constante de normalización y β el parámetro real adimensional.

Esta función de prueba cumple con las condiciones en la frontera del sistema y, mediante el proceso de integración, obtenemos la constante de normalización

$$N^2 = \frac{\beta}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right) a^3}. \quad (3.34)$$

Aplicando el hamiltoniano de este sistema, expresado en (3.1), a nuestra

función de prueba queda

$$\hat{H}\phi = -\frac{N\hbar^2\beta^2 y^{2\beta-1}}{m(1+a^{-\beta}y^\beta)^3 a^{2\beta}} + \frac{N\hbar^2\beta(\beta+1)y^{\beta-1}}{2m(1+a^{-\beta}y^\beta)^2 a^\beta} + \frac{N\mathcal{E}y^2}{1+a^{-\beta}y^\beta} \quad (3.35)$$

Para calcular la cota superior a la energía del estado base, necesitamos obtener $E(\beta)$, por lo que multiplicamos (3.35) por $\phi^*(y, \beta)$ e integramos para tener

$$E(\beta) = N^2 \int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2\beta^2 y^{2\beta}}{m a^{2\beta} (1+a^{-\beta}y^\beta)^4} + \frac{\hbar^2\beta^2(\beta+1)y^\beta}{2m a^\beta (1+a^{-\beta}y^\beta)^3} + \frac{\mathcal{E}y^3}{(1+a^{-\beta}y^\beta)^2} \right] dy$$

Las integrales indicadas se realizan usando el resultado (C.4) del apéndice C

$$E(\beta) = \frac{\hbar^2 N^2 a}{12m} (\beta+1) \Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right) + \mathcal{E} N^2 a^4 \frac{1}{\beta} \Gamma\left(\frac{4}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{4}{\beta}\right) \quad (3.36)$$

sustituyendo ahora el valor de la constante de normalización y haciendo uso del valor de la constante a , ecuación (3.3), queda

$$E(\beta) = \mathcal{E} a \left[\frac{1}{6} \beta(\beta+1) \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)} + \frac{\Gamma\left(\frac{4}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{4}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)} \right] \quad (3.37)$$

En la Figura 3.5 se muestra la gráfica de $E(\beta)$, esta función presenta un mínimo, para encontrar el valor de β donde ocurre el mínimo lo hacemos de la forma tradicional, obteniendo

$$\beta_m = 2.78202 \quad (3.38)$$

Sustituyendo este resultado en la expresión para la energía (3.37) obtenemos la mínima cota superior a la energía del estado base calculada con la familia de funciones (3.33)

$$W_0 \geq 2.77686 \mathcal{E} a \quad (3.39)$$

Ahora nos proponemos calcular la cota inferior de la energía del estado base. Primero obtenemos $\langle \hat{H}^2 \rangle$, para ello usamos el resultado (3.35) elevándolo al cuadrado, para tener

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 \int_0^\infty & \left[\frac{\hbar^4 \beta^4 y^{4\beta-2}}{m^2 a^{4\beta} (1+a^{-\beta}y^\beta)^6} + \frac{\hbar^4 \beta^2 (\beta+1)^2 y^{2\beta-2}}{4m^2 a^{2\beta} (1+a^{-\beta}y^\beta)^4} + \frac{\mathcal{E}^2 y^4}{(1+a^{-\beta}y^\beta)^2} \right. \\ & \left. - \frac{\hbar^4 \beta^3 (\beta+1) y^{3\beta-2}}{m^2 a^{3\beta} (1+a^{-\beta}y^\beta)^5} - \frac{2\hbar^2 \beta^2 \mathcal{E} y^{2\beta+1}}{m a^{2\beta} (1+a^{-\beta}y^\beta)^4} + \frac{\hbar^2 \beta (\beta+1) \mathcal{E} y^{\beta+1}}{m a^\beta (1+a^{-\beta}y^\beta)^3} \right] dy \end{aligned}$$

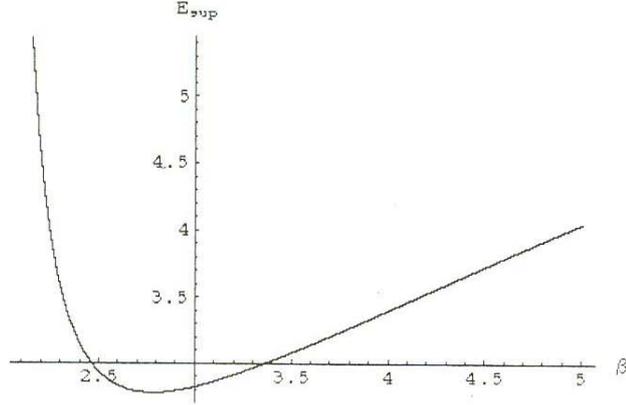


Figura 3.5: Gráfica de la energía como función del parámetro β

estas integrales se calculan en el apéndice C. En términos de la integral $I_{m,n}(\beta)$, ecuación (C.1) del apéndice C, resulta

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 \left[\frac{\hbar^4 \beta^4}{m^2 a^{4\beta}} I_{4\beta-2,6} + \frac{\hbar^4 \beta^2 (\beta+1)^2}{4m^2 a^{2\beta}} I_{2\beta-2,4} + \mathcal{E}^2 I_{4,2} \right. \\ \left. - \frac{\hbar^4 \beta^3 (\beta+1)}{m^2 a^{3\beta}} I_{3\beta-2,5} - \frac{2\hbar^2 \beta^2 \mathcal{E}}{m a^{2\beta}} I_{2\beta+1,4} + \frac{\hbar^2 \beta (\beta+1) \mathcal{E}}{m a^\beta} I_{\beta+1,3} \right]$$

finalmente usando el resultado (C.4) queda

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = N^2 \left[\frac{\hbar^4 \beta^3 \Gamma(4 - \frac{1}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{1}{\beta})}{m^2 a \Gamma(6)} + \frac{\hbar^4 \beta (\beta+1)^2 \Gamma(2 - \frac{1}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{1}{\beta})}{4m^2 a \Gamma(4)} \right. \\ \left. + \frac{\mathcal{E}^2 a^5 \Gamma(\frac{5}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{5}{\beta})}{\beta \Gamma(2)} - \frac{\hbar^4 \beta^2 (\beta+1) \Gamma(3 - \frac{1}{\beta}) \Gamma(2 + \frac{1}{\beta})}{m^2 a \Gamma(5)} \right. \\ \left. - \frac{2\hbar^2 \beta \mathcal{E} a^2 \Gamma(2 + \frac{2}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{2}{\beta})}{m \Gamma(4)} + \frac{\hbar^2 (\beta+1) \mathcal{E} a^2 \Gamma(1 + \frac{2}{\beta}) \Gamma(2 - \frac{2}{\beta})}{m \Gamma(3)} \right].$$

Simplificando las funciones gama, sustituyendo el valor de la constante de normalización, que está dada por (3.34), y sustituyendo el valor de la cons-

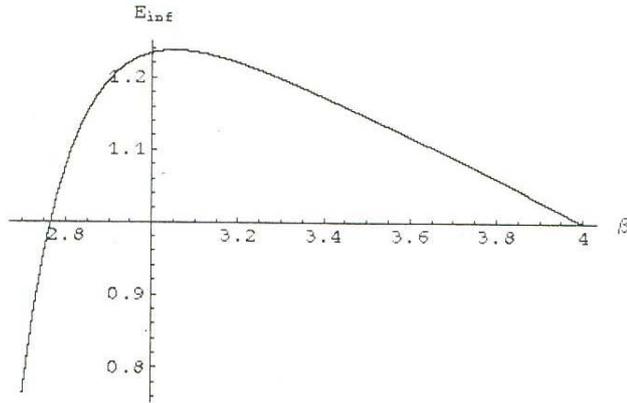


Figura 3.6: Cota inferior a la energía del estado base como función del parámetro β .

tante a , dada por (3.3), resulta

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle = \mathcal{E}^2 a^2 & \left[\frac{1}{30} \beta^2 (\beta^2 + 11) \frac{\Gamma\left(2 - \frac{1}{\beta}\right) \Gamma\left(2 + \frac{1}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)} \right. \\ & \left. + \frac{1}{3} \beta (\beta - 1) \frac{\Gamma\left(1 + \frac{2}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{2}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)} + \frac{\Gamma\left(\frac{5}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{5}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{\beta}\right) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\beta}\right)} \right] \quad (3.40) \end{aligned}$$

Con esta expresión y con ayuda de $E(\beta)$, dada por (3.37), calculamos la función $\Delta^2(\beta)$, lo cual nos permite encontrar la cota inferior para la energía del estado base, como función del parámetro β ; ésta la obtenemos sustituyendo $E(\beta)$ y $\Delta^2(\beta)$ en (2.57).

En la Figura 3.6 hemos graficado la función $E_{\text{inf}}(\beta)$ contra el parámetro β . De la gráfica podemos ver que esta función alcanza un máximo para cierto valor del parámetro β , este valor lo calculamos numéricamente, resulta

$$\beta_M = 3.053197 \quad (3.41)$$

Sustituyendo este valor de β_M en la expresión de $E_{\text{inf}}(\beta)$ obtenemos la máxima cota inferior a la energía del estado base, esto es

$$W_0 \geq 1.23795 \mathcal{E} a. \quad (3.42)$$

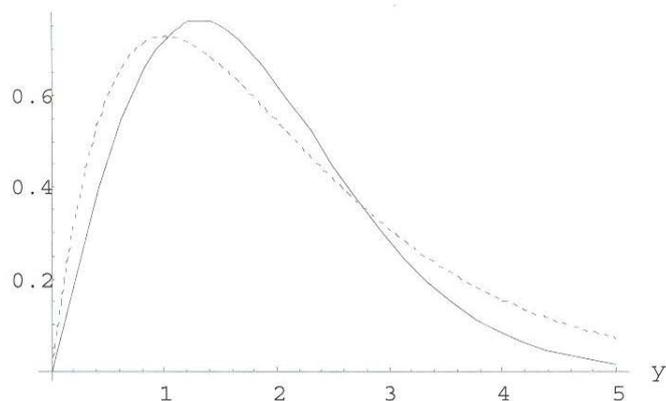


Figura 3.7: Función de onda exacta y aproximada para el estado base del rebotador cuántico. La curva punteada representa a la función gaussiana para el parámetro $\beta = 0.98871$

Este resultado, junto con el presentado en (3.39), constituyen las mejores cotas para el eigenvalor de la energía del estado base del rebotador cuántico.

De las tres secciones anteriores podemos ahora comparar los resultados obtenidos al aplicar el método variacional al problema de la partícula en un campo uniforme. Los resultados están contenidos en las expresiones (3.43), (3.44) y (3.45):

- Función de prueba tipo exponencial

$$1.56006 \mathcal{E}a \leq W_0 \leq 2.47645 \mathcal{E}a \quad (3.43)$$

- Función de prueba tipo gaussiana

$$1.75195 \mathcal{E}a \leq W_0 \leq 2.49934 \mathcal{E}a \quad (3.44)$$

- Función de prueba tipo lorentziana

$$1.23795 \mathcal{E}a \leq W_0 \leq 2.77686 \mathcal{E}a \quad (3.45)$$

Considerando que el intervalo de energía permitido es más estrecho para la función de prueba tipo gaussiana, concluimos que esta función para el parámetro $\beta = 0.98871$ es la mejor aproximación a la solución exacta.

En la Figura 3.7 se compara la solución exacta con la función de prueba

$$\phi(y, \beta) = Nye^{-a^{-\beta}y^{\beta}},$$

con un valor del parámetro β el cual minimiza la cota superior

4. Conclusiones

En este trabajo hemos mostrado que el rebotador cuántico es un problema muy completo para ilustrar el tratamiento a la ecuación de Schrödinger, ya que en este caso la ecuación no puede ser resuelta con el uso de funciones elementales y requiere emplear el método de solución en series de potencias. Como el sistema sólo tiene estados ligados, las eigenfunciones tienen que caer a cero en el infinito y la solución encontrada puede ser normalizada; de nueva cuenta, la normalización se consigue siguiendo un procedimiento que escapa de los tradicionales. A su vez, como el espectro de energía queda en términos de los ceros de la función de Airy y como no se conocen expresiones analíticas para éstos, es necesario emplear métodos numéricos para calcularlos. Para ello, diseñamos un programa en lenguaje C que nos proporciona los ceros con una aproximación de seis dígitos significativos, pero que sin ninguna dificultad puede ser generalizado para obtener una aproximación de orden más alto. De esta manera el rebotador cuántico termina siendo un problema elemental que ilustra el uso de técnicas no convencionales en su solución.

El método variacional o de Ritz constituye uno de los instrumentos más sencillos y poderosos de los métodos de aproximación de la mecánica cuántica, como fue ilustrado con los ejemplos del oscilador armónico y del átomo de hidrógeno que revisamos en el capítulo dos de este trabajo. El método variacional proporciona una cota superior a la energía del estado base que es tan buena como buena es la función de prueba que se use. Sin embargo el método tiene el problema de que no cuenta con un criterio para determinar la exactitud del resultado obtenido, en caso de que no se conociera el valor exacto. Por ello, hemos construido una variante del método variacional que, en determinados casos, nos proporciona una cota inferior a la energía. Con ambas cotas, la superior del método de Ritz y la inferior del método generalizado, obtenemos una visión más clara de la aproximación que estamos logrando. Así, por ejemplo, cuando la cota superior y la cota inferior coinciden en un punto, ese valor corresponde al eigenvalor exacto de la energía y la función de prueba coincide con la función de onda exacta del estado base. De nuevo, esto fue ilustrado en el capítulo dos con los ejemplos mencionados del oscilador

armónico y del átomo de hidrógeno usando familias de funciones de prueba que contenían la función de onda exacta. Sin embargo, la teoría desarrollada garantiza la existencia de la cota inferior sólo para aquellas funciones de prueba que predicen un valor esperado de la energía que se encuentra más cerca del estado base que de cualquier otro eigenvalor, lo cual se consigue con una buena elección de la función de prueba.

Aunque en este trabajo no exploramos otra dirección que la predicción del estado base, la variante del método variacional, y por ende la cota inferior, puede ser aplicada al cálculo de las energías de los estados excitados; en cuyo caso la función de prueba que se use, además de cumplir los requisitos exigidos por el método variacional tradicional aplicado a estos estados excitados, debe de predecir un valor esperado de la energía que se encuentre más cerca del correspondiente eigenvalor de la energía que se quiere aproximar que de cualquier otro eigenvalor.

En el tercer capítulo aplicamos la teoría anterior al cálculo de la energía del estado base del rebotador cuántico, las familias de funciones de prueba que usamos no contienen a la función de onda exacta ya que ésta es una función de Airy. Obtenemos las curvas de cota inferior como función del parámetro de la familia de funciones de prueba. En dos de los tres casos la cota inferior posee un máximo que permite acotar la predicción de la energía del estado base entre dos valores óptimos, el mínimo de la cota superior y el máximo de la cota inferior, aunque ambos extremos se realizan para valores diferentes del parámetro. En el caso de funciones de prueba tipo exponencial la cota inferior de la energía no posee un máximo por lo que fue necesario minimizar la función $\Delta(\beta)$ para obtener la cota óptima a la energía del estado base.

Apéndice A. Reducción de la ecuación de Airy a una ecuación de Bessel

Partimos de la ecuación de Airy

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - xu(x) = 0$$

y proponemos el siguiente cambio de función:

$$u(x) = x^n v(x) \tag{A.1}$$

donde n es un parámetro por determinar.

Para sustituir en la ecuación de Airy requerimos la segunda derivada de (A.1), dada por

$$u''(x) = n(n-1)x^{n-2}v(x) + 2nx^{n-1}v'(x) + x^n v''(x)$$

donde la prima indica la derivada con respecto a x .

Sustituyendo en la ecuación de Airy queda

$$x^n v''(x) + 2nx^{n-1}v'(x) + [n(n-1)x^{n-2} - x^{n+1}]v(x) = 0$$

Extraemos y cancelamos el factor x^{n-2} para tener

$$x^2 v''(x) + 2nxv'(x) + [n(n-1) - x^3]v(x) = 0. \tag{A.2}$$

Ahora, llevamos a cabo el siguiente cambio de variable

$$t = x^m, \tag{A.3}$$

con m un nuevo parámetro que fijaremos más adelante. Usando la regla de la cadena calculamos la primera y la segunda derivada de $v(x)$, el resultado es,

$$\begin{aligned} v'(x) &= \frac{dv}{dt} \frac{dt}{dx} = \frac{dv}{dt} mx^{m-1} = mt^{1-\frac{1}{m}} v'(t) \\ v''(x) &= m(m-1)t^{\frac{m-2}{m}} v'(t) + m^2 t^{2(\frac{m-1}{m})} v''(t). \end{aligned}$$

Sustituyendo en (A.2) obtenemos

$$t^{\frac{2}{m}} \left[m(m-1)t^{\frac{m-2}{m}} v'(t) + m^2 t^{2(\frac{m-1}{m})} v''(t) \right] + 2nt^{\frac{1}{m}} m t^{1-\frac{1}{m}} v'(t) + \left[n(n-1) - t^{\frac{3}{m}} \right] v(t) = 0$$

Agrupando los términos proporcionales a $v'(t)$ y dividiendo por m^2 queda

$$t^2 v''(t) + \left[\frac{(m-1)}{m} + \frac{2n}{m} \right] t v'(t) + \left[\frac{n(n-1)}{m^2} - \frac{t^{\frac{3}{m}}}{m^2} \right] v(t) = 0 \quad (\text{A.4})$$

Esta ecuación tiene la estructura de una ecuación de Bessel modificada, que es de la forma

$$t^2 y'' + t y' - (k^2 t^2 + \alpha^2) y = 0,$$

por lo tanto identificando coeficientes encontramos que $\frac{3}{m}$ debe ser igual a 2, es decir $m = \frac{3}{2}$. Por otro lado, el coeficiente de $t v'(x)$ debe ser igual a uno, por lo tanto

$$\frac{m-1}{m} + \frac{2n}{m} = 1$$

es decir,

$$n = \frac{1}{2}.$$

Ahora sustituimos m y n en (A.4) para tener

$$t^2 v''(t) + t v'(t) - \left(\frac{4}{9} t^2 + \frac{1}{9} \right) v(t) = 0. \quad (\text{A.5})$$

De esta manera, hemos transformado la ecuación de Airy en una ecuación de Bessel modificada con parámetros

$$k = \frac{2}{3} \quad y \quad \alpha = \frac{1}{3}.$$

La solución de la ecuación de Bessel modificada (A.5) tiene la forma

$$v(t) = C_1 I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}t\right) + C_2 I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}t\right), \quad (\text{A.6})$$

donde C_1 y C_2 son constantes arbitrarias y la función $I_{\pm\frac{1}{3}}(t)$ se conoce como función de Bessel modificada de orden $\pm\frac{1}{3}$.

Regresamos a la variable x , mediante el cambio $t = x^{\frac{3}{2}}$,

$$v(x) = C_1 I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) + C_2 I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)$$

y sustituyendo en (A.1), junto con $n = \frac{1}{2}$ obtenemos la función $u(x)$

$$u(x) = x^{\frac{1}{2}} \left[C_1 I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) + C_2 I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) \right]. \quad (\text{A.7})$$

Por otro lado, como se mencionó en el capítulo 1, la solución a la ecuación de Airy se da en términos de las funciones $Ai(x)$ y $Bi(x)$. Estas funciones están relacionadas a las funciones Bessel modificada de orden $\pm\frac{1}{3}$ mediante las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} Ai(x) &= \frac{\sqrt{x}}{3} \left[I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) - I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) \right] \\ Bi(x) &= \sqrt{\frac{x}{3}} \left[I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) + I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Tomando la suma y resta de estas dos expresiones obtenemos

$$u(x) = CAi(x) + DBi(x)$$

con C y D dos nuevas constantes.

Apéndice B. Cálculo de ceros de la función de Airy

Este programa utiliza el método de Runge-Kutta de orden cuatro, el cual es apropiado para estudiar una ecuación diferencial de la forma $\psi''(x) = f(x, \psi(x))$, para encontrar los ceros de la función de Airy. Como es común cuando se hacen integrales numéricas, la aplicación de esta técnica requiere de la especificación de los valores iniciales de la función $\psi(x_0)$ y su derivada $\psi'(x_0)$ en un punto x_0 . Estos valores son obtenidos de las condiciones en la frontera que nos dicen que la función y su primera derivada son nulas cuando x tiende al infinito. Los valores iniciales son $\psi(x_0 = 5) = 2^{-16}$ y $\psi'(x_0 = 5) = -2^{-16}$. Además de introducir los valores iniciales, también tenemos que introducir el valor del incremento. Un incremento de la forma 2^k , donde k es un entero, tiende a minimizar errores de redondeo en este tipo de cálculos; en particular un incremento de $H = 2^{-7}$ ($\cong 0.008$) nos da los ceros de $\psi(x)$ con una aproximación de 10^{-6} .

El programa empieza en x_0 e integra hacia $-\infty$ en incrementos de H hasta que el número de ceros deseados han sido encontrados. Si el signo de $\psi(x_i)$ difiere de $\psi(x_{i-1})$, el programa realiza una interpolación lineal entre $\psi(x_i)$ y $\psi(x_{i-1})$ y regresa el valor de x_z para el cual $\psi(x_z) = 0$

Así

$$x_z = \frac{-H\psi(x_i)}{\psi(x_i) - \psi(x_{i-1})} + x_{i-1}. \quad (\text{B.1})$$

A continuación se presenta el programa que nos calcula los ceros de la función de Airy

```
#include<math.h>
#include<stdio.h>
void main()
{
float H,K1,K2,K3,L1,N,S,X,X1,Y,Y1;
```

```

/** H es el tamaño del paso
    K1, K2 y K3 son las evaluaciones de la función
    N es el numero de ceros a encontrar
    S es el contador de ceros
    X Es un valor inicial
    X1 Es el valor del cero
    Y es el valor de la función en el punto X
    Y1 es el valor de la pendiente en el punto X
    L1 es una variable temporal que va almacenando los valores de la funcion
*/
printf("—AIRY ZEROS—\n");
/** Lectura del numero de ceros a encontrar */
printf("Input number of zeros to be found\n");
scanf("%f", &N);
/** Empieza el cálculo de los ceros */
S=1.;
/** Se da el valor inicial para  $x = 5$  */
X=5.;
/**El valor de la función en  $x = 5$  */
Y=pow(2.,-16.);
Y1=-Y;
/**El valor del paso */
H=-pow(2.,-7.);
for( ; ; )
{
L1=Y;

```

```

if (S>N) exit(0);
/** Comienzan las evaluaciones a la función */
K1=H*X*Y;
K2=H*(X+H/2.)*(Y+((H/2.)*Y1)+((H/8.)*K1));
K3=H*(H+X)*(Y+(H*Y1)+(H/2.)*K2);
/** Se incrementa el valor de X con el paso dado */
X=X+H;
Y=Y+H*(Y1+(1./6.)*(K1+2*K2));
Y1=Y1+(1./6.)*K1+(2./3.)*K2+(1./6.)*K3;
if (Y*L1>0.) continue;
X1=-(Y*H)/(Y-L1)+X;
printf("S=%f,%f\n",S,X1);
S=S+1;
}
}

```

Apéndice C. Cálculo de la integral $I_{m,n}(\beta)$

En este apéndice calculamos la integral

$$I_{m,n}(\beta) = \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(1 + a^{-\beta}x^\beta)^n} dx. \quad (\text{C.1})$$

Para calcular la integral anterior hacemos el cambio de variable

$$t = a^{-\beta}x^\beta, \quad (\text{C.2})$$

con este cambio obtenemos

$$I_{m,n}(\beta) = \int_0^{\infty} a^m t^{\frac{m}{\beta}} (1+t)^{-n} \frac{a}{\beta} t^{\frac{1}{\beta}-1} dt$$

es decir

$$I_{m,n}(\beta) = \frac{a^{m+1}}{\beta} \int_0^{\infty} t^{\frac{m+1}{\beta}-1} (1+t)^{-n} dt. \quad (\text{C.3})$$

La integral de la expresión anterior es una función Beta[11], por lo tanto

$$I_{m,n}(\beta) = \frac{a^{m+1}}{\beta} B\left(\frac{m+1}{\beta}, n - \frac{m+1}{\beta}\right),$$

en términos de funciones gama queda

$$I_{m,n}(\beta) = \frac{a^{m+1}}{\beta} \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{\beta}\right) \Gamma\left(n - \frac{m+1}{\beta}\right)}{\Gamma(n)} \quad (\text{C.4})$$

Bibliografía

- [1] "The Quantum Bouncer" R. L. Gibbs. Am. J. Phys. **43**, 25 (1975)
- [2] "Schrödinger Particle in a Gravitational Well" P. W. Langhoff Am. J. Phys. **39**, 954 (1971)
- [3] "Quantum Bouncer in a Closed Court" V. C. Aguilera-Navarro, H. Iwamoto, E. Ley-Koo, and A. H. Zimerman. Am. J. Phys. **49**, 648 (1981)
- [4] "The Quantum Bouncer Revisited" R. D. Desko and D. J. Bord Am. J. Phys. **51**, 82 (1983)
- [5] "Note on the Quantum Bouncer" I. Richard Lapidus Am. J. Phys. **51**, 84 (1983)
- [6] "Elementary Examples of Adiabatic Invariance" Frank S. Crawford Am. J. Phys. **58**, 337 (1990)
- [7] "Variational Treatment of the Linear Potencial" B. Cameron Reed Am. J. Phys. **58**, 407 (1990)
- [8] "Expectation Value Analysis of Wave Packet Solutions for the Quantum Bouncer: Short-term and Long-term Revival Behaviors" M. A. Donchieski and R. W. Robinett Am. J. Phys. **69**, 1084 (2001)
- [9] "A Quantum Bouncing Ball" Julio Gea-Banacloche. Am. J. Phys. **67**, 776-782 (1999)
- [10] *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Luis de la Peña (Ediciones Científicas Universitarias, 1991) Capítulo 17
- [11] *Handbook of Mathematical Functions*, M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York, 1965)
- [12] *Notas de los Cursos de Métodos Matemáticos de la Física*, Departamento de Física UNISON (En edición)
- [13] *Quantum Mechanics*. Linus Pauling and E. Bright Wilson Jr. (Addison-Wesley Reading, MA, 1961), p. 398