Física Teórica 2 - Método variacional

14 de junio de 2013

1. El teorema

Supongamos el problema de un Hamiltoniano del cual **no** conocemos la base de autoestados $\{|n\rangle\}$ ni las energías E_n. En muchas aplicaciones físicas es importante tener una estimación de la energía del estado fundamental E_0.

Supongamos además que con un poco de intuición creamos un ket de prueba $|\tilde{0}\rangle$, no necesariamente normalizado, que puede aproximar bastante bien al estado fundamental $|0\rangle$. Definimos:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle\tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle}{\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle} \tag{1}$$

Se puede mostrar fácilmente en 3 pasos (ver Sakurai) que $\mathcal{H}$ satisface

$$\mathcal{H} \geq E_0 \tag{2}$$

Es decir que no importa el estado que use para evaluar $\mathcal{H}$, esta cuenta va a ser siempre mayor que la energía del fundamental.

La estrategia es entonces construir un ket $|\tilde{0}\rangle$ que dependa de un conjunto de parámetros $a_1, a_2, ...a_k$. Sucede entonces que la función $\mathcal{H}$ dependerá de estos parámetros:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(a_1, ..., a_k) \tag{3}$$

Una vez calculado $\mathcal{H}$, podemos minimizarlo considerando

$$\frac{\partial}{\partial a_j}\mathcal{H}(a_1, ..., a_k) = 0 \quad j = 1, ..., k \tag{4}$$

De esta forma, evaluando nuevamente $\mathcal{H}$ en los valores de a_i que minimizan $\mathcal{H}$ obtenemos una aproximación cada vez mejor de la energía del fundamental.

2. Ejercicio 12 de la guía

2.1. Función de prueba propuesta por la guía

El ejercicio 12 de la guía dice que:

Estime el autovalor λ mas bajo de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\,\psi = 0, \quad \psi \to 0 \text{ para } |x| \to \infty,$$

usando el método variacional con

$$\psi = \begin{cases} c(\alpha - |x|) & \text{para}|\text{x}| < \alpha \\ 0 & \text{para}|\text{x}| > \alpha \ , \end{cases}$$

como función de prueba de parámetro variacional α. Tenga cuidado porque $d\psi/dx$ es discontinua en $x = 0$.

Podemos reformular este problema de la forma

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi \tag{5}$$

donde

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + |x| \tag{6}$$

El cuidado que tenemos que tener con nuestra función de onda tiene que ver con que

$$\frac{d}{dx}|x| = \text{sgn}(x) \qquad \frac{d}{dx}\text{sgn}(x) = 2\delta(x) \tag{7}$$

donde sgn(x) es la función "signo" y $\delta(x)$ es la delta de Dirac. De aquí que

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = -2c\delta(x) \tag{8}$$

Para calcular $\mathcal{H}$ necesitamos

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int dx\, \psi^* \hat{H}\psi = c^2 \left[2\alpha + \int_{-\alpha}^{\alpha} dx\, (\alpha^2 x - 2\alpha x^2 + x^3)\right] = c^2(2\alpha + \frac{\alpha^4}{6}) \tag{9}$$

y además

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx\, \psi^* \psi = \frac{2}{3}c^2\alpha^3 \tag{10}$$

Por lo tanto nuestra función $\mathcal{H}$ nos queda

$$\mathcal{H} = \frac{3}{\alpha^2} + \frac{\alpha}{4} \tag{11}$$

Tomando la derivada

$$\frac{d\mathcal{H}}{d\alpha} = -\frac{6}{\alpha^3} + \frac{1}{4} = 0 \quad \rightarrow \alpha = 2 \times 3^{1/3} \tag{12}$$

Sustituyendo en $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H}(2 \times 3^{1/3}) = \frac{3}{4} \times 3^{1/3} = 1{,}08169... \tag{13}$$

Y notemos que el valor verdadero es 1,01879... con lo cual nuestra aproximación con esa función horrenda tiene un 6 % de error solamente!!!

2.2. Con otra función de prueba

En vez de la función propuesta por la guía intentemos otra estrategia. Mirando el hamiltoniano podemos pensar que este corresponde a una partícula en una dimensión sujeta a un potencial del tipo $V = |x|$. La forma del potencial es visualmente similar a un potencial armónico del tipo $V = x^2$. Como sabemos que la Gaussiana es el autoestado fundamental del oscilador armónico, podemos aplicar el metodo variacional para el problema de la guía con una función de prueba que sea una Gaussiana cuyo ancho vamos a optimizar.

Consideramos entonces

$$\psi(x) = e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} \tag{14}$$

donde α es el parametro a variar. Haciendo las integrales obtenemos que

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{1}{\alpha} + \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{\alpha}}{2} \qquad \langle\psi|\psi\rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}} \tag{15}$$

y por lo tanto

$$\mathcal{H}(\alpha) = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\alpha}} \tag{16}$$

El valor de α que minimiza $\mathcal{H}(\alpha)$ es $\alpha = \pi^{-1/3}$. Sustituyendo este valor en $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H}(\pi^{-1/3}) = \frac{3}{2}\pi^{-1/3} = 1{,}02418 \tag{17}$$

Esta vez el error es del 0,5 %!!!