

# Pauta C2

A.González

14 de noviembre de 2009

## Problema 1

### a) 2 punto

El método variacional estima la energía  $E_0$  del estado fundamental de un sistema. Se basa en que de la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi$$

se deduce, para el  $n$ -ésimo autoestado

$$E_n = \frac{\langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle}$$

Como el estado fundamental es el de mínima energía, y los autoestados forman un conjunto completo, se deduce que, para *cualquier* función  $\Psi$ , normalizada, se tiene

$$E_0 \leq \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (1)$$

Usualmente se considera una familia de funciones que dependen de uno o más parámetros  $\alpha_i$ . Se calcula  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$  y se encuentra el mínimo con respecto a los parámetros:

$$\sum_i \partial_{\alpha_i} \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (2)$$

lo que determina valores de  $\alpha_i$ . Sustituyendo en (1) se obtiene una cota superior para la energía del estado fundamental.

### b) 2 puntos

(2pts) En este paso a pesar de poder proponer una función de onda cualquiera, se deben cumplir un par de restricciones. La primera y la más evidente es que para  $x = 0$  la función de onda (y la densidad de probabilidad) debe valer 0. Luego debe corresponder a un perfil de estado fundamental, esto es con un sólo máximo de probabilidad. Y finalmente que decaiga en la zona en la cual el potencial el mayor que la energía.

(1pto) Además se deben realizar los cálculos de buena manera, estos siguiendo el método variacional.

Por ejemplo se puede utilizar la siguiente función de prueba.

$$\phi = x e^{-x^2 \alpha} \quad (3)$$

Con el parámetro a variar dado por  $\alpha$ . Ahora bien si normalizamos, se obtiene:

$$\phi = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}} x e^{-x^2 \alpha}}{8\alpha^{3/2}} \quad (4)$$

De esta forma al calcular el valor de expectación de H, hallamos que

$$E_0 \leq \frac{\pi (4km + 3\sqrt{2}\pi\alpha^{3/2}\hbar^2)}{4096m\alpha^5} \quad (5)$$

Finalmente buscamos el mínimo de  $\alpha$  dado por

$$\alpha = 0,580104 \sqrt[3]{\frac{\hbar^{28}}{k^{11}m^{14}}} \quad (6)$$

con lo que finalmente obtenemos que  $E_0$  está dada por.

$$E_0 \leq \frac{k^{77/6}m^{46/3} (0,0467005k^{13/2}m^8 + 0,038791\hbar^{16})}{\hbar^{140/3}} \quad (7)$$

### c) 1 punto

La autocrítica primero debe ser estar ligada a a si la función de onda cumple las condiciones del apartado b). Aunque el detalle, depende de cada función de onda utilizada.

Para la función propuesta, es claro que cumple las condiciones de borde necesarias. Pero podría ser mejorada incorporando un máximo en una posición más adecuada (más cerca de la pared de potencial infinito que de la recta de potencial). De esta manera la función de prueba se asemejaría de mejor forma al comportamiento esperado de la función de onda real. Ambas correcciones ayudarían a tener una mejor estimación de la energía.

### d) 1 punto

Utilizando el mismo proceso para encontrar una cota para el estado fundamental, se utiliza una función de onda que cumpla las condiciones de los estados excitados. En particular, que sea ortogonal a la función ya estimada para el estado fundamental. Reduciéndose a calcular nuevamente lo del apartado a), pero esta vez con nuevas funciones de prueba representativas del estado excitado el cual está siendo inspeccionado.

## Problema 2

### a) 3 puntos

Se considera un sistema descrito por un Hamiltoniano independiente del tiempo  $H_0$ , con autoestados  $|n\rangle$  y autoenergías  $E_n$ :

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$$

que es perturbado por un Hamiltoniano  $H_1(t)$  dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + H_1)\Psi \quad (8)$$

y se busca la solución de la forma

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (9)$$

con esto podemos calcular  $C_m(t)$  a primer orden, asumiendo que el estado inicial está bien definido, obtenemos que,

$$C_m(t) \approx C_m(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{nm}t} \langle m|H|n\rangle dt \quad (10)$$

Tal que  $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ . Así podemos obtener la probabilidad de transición de un estado  $n$  a otro  $m$ , dada por  $|C_m|^2$ .

### b) 3 puntos

Con el resultado anterior podemos plantear la probabilidad de que un oscilador armónico inicialmente en su primer estado pase al segundo estado excitado. Para esto calculamos  $C_2$ .

$$C_2(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{12}t} \langle 2|x E_0 e^{-t/2}|1 \rangle dt \quad (11)$$

tomando que  $t \gg \tau$  o sea tiempos muy largos. se obtiene que

$$C_2(t) = \frac{-i}{\hbar} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} E_0 \langle 2|x|1 \rangle \quad (12)$$

Así sólo falta calcular la parte espacial, la cual se podía resolver usando representación de coordenadas o en el espacio de Hilbert del Oscilador Armónico, mediante operadores de subida o bajada. De ambas formas el resultado es

$$C_2(t) = \frac{-i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} E_0 \quad (13)$$

Finalmente la probabilidad de transición de uno a dos.

$$P_{1 \rightarrow 2} = |C_2|^2 = \frac{E_0^2 \tau_0^2}{\hbar m \omega (1 + \omega^2 \tau^2)} \quad (14)$$

## Problema 3

### a) 2 puntos

La función de onda para puntos lejanos del centro de scattering es, en primera aproximación de Born,

$$\psi \simeq e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \mathbf{V}(\mathbf{r}_0) d^3r_0 \quad (15)$$

por lo que

$$f(\theta, \phi) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \mathbf{V}(\mathbf{r}_0) d^3r_0 \quad (16)$$

de esta forma si utilizamos la primer aproximación de Born y consideramos que estamos en un potencial esféricamente simétrico, se obtiene

$$f(\theta, \phi) \simeq -\frac{2m}{\kappa\hbar^2} \int_0^\infty r V(r) \sin(\kappa r) dr \quad (17)$$

dónde  $\kappa = 2k \sin(\theta/2)$ .

### b) 3 puntos

Si se reemplaza el potencial tipo delta en la ecuación (17) y se integra, se obtiene

$$\begin{aligned} f &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2\kappa} a \sin(\kappa a) \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= f^2 = \left( \frac{2m\alpha}{\hbar^2\kappa} a \right)^2 \sin^2(\kappa a) \end{aligned} \quad (18)$$

dónde  $\kappa = 2k \sin(\theta/2)$ .

**c) 1 punto**

Finalmente si consideramos  $\lambda_{Broglie} \gg a$  implica que  $\kappa a \ll 1$  con lo que  $\sin \kappa a \approx \kappa a$ . Con esto la sección eficaz queda resulta

$$f = \frac{2m\alpha a^2}{\hbar^2} \quad (19)$$

El cual responde al límite de bajas energías.