Métodos de aproximación

Método variacional

- Para H independiente de t
- $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ (suponemos discreto y no degenerado)
- Desconocemos E_n y $|\varphi_n\rangle$ $(E_0 < E_1 < E_2 < \cdots)$

Consideremos $|\psi\rangle$ arbitrario (ni siquiera debe de estar normalizado).

energía del estado base

$$\mathcal{E}[|\psi\rangle] = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

ojo $\mathcal{E} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{R}$

funcional de energía

Demostremos que $\mathcal{E}[|\psi\rangle] \geq E_0$

Sea $|\psi\rangle = \sum_n c_n|\varphi_n\rangle$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_n\sum_m c_n^* c_m \langle\varphi_n|H|\varphi_m\rangle = \sum_n\sum_m c_n^* c_m E_m \overbrace{\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle}^{\delta_{nm}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2$$

La igualdad se cumble cuando $|\psi\rangle = |\varphi_0\rangle$; $c_n = \delta_{0n}$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2$$

$$\therefore \quad \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

Método variacional

1. Proponer un conjunto de kets de prueba usando argumentos físicos.
2. Encontrar el elemento $|\psi_0\rangle$ de este conjunto que minimiza $\tilde{\mathcal{E}}$. Este ket es una aproximación a $|\varphi_0\rangle$ con e-valor aproximado $\tilde{\mathcal{E}}[|\psi_0\rangle]$.

Para justificar el método veamos cómo se comporta $\tilde{\mathcal{E}}[|\psi\rangle]$ alrededor de un eigenvector $|\varphi_n\rangle$ de H.

$\lambda \ll 1$ ket arbitrario.

Consideremos $|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda|\phi\rangle$

$$\langle\psi|\psi\rangle\,\tilde{\mathcal{E}}[|\psi\rangle] = \langle\psi|H|\psi\rangle$$

$|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda|\phi\rangle$ $|\varphi_n\rangle + \lambda|\phi\rangle$

$$\left[\cancelto{1}{\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle} + \lambda\left(\langle\varphi_n|\phi\rangle + \langle\phi|\varphi_n\rangle\right) + \cancel{\lambda^2\langle\phi|\phi\rangle}\right]\tilde{\mathcal{E}}[|\psi\rangle]$$
$$= \langle\varphi_n|H|\varphi_n\rangle + \lambda\left(\langle\varphi_n|H|\phi\rangle + \langle\phi|H|\varphi_n\rangle\right) + \cancel{\lambda_2\langle\phi|H|\phi\rangle}$$

- Despreciamos términos de orden λ^2
- Derivamos respecto a λ

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}}{d\lambda}\left[|\varphi_n\rangle + \cancel{\lambda|\phi\rangle}\right] + \left(\langle\varphi_n|\phi\rangle + \langle\phi|\varphi_n\rangle\right)\tilde{\mathcal{E}}\left[|\varphi_n\rangle + \cancel{\lambda|\phi\rangle}\right]$$
$$\cancel{+\lambda\left(\langle\varphi_n|\phi\rangle + \langle\phi|\varphi_n\rangle\right)\frac{d}{d\lambda}\tilde{\mathcal{E}}[|\psi\rangle]}$$

$$= \langle\varphi_n|H|\phi\rangle + \langle\phi|H|\varphi_n\rangle$$

- Hacemos $\lambda \to 0$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}}{d\lambda}[|\varphi_n\rangle] + \cancel{\left(\langle\varphi_n|\phi\rangle + \langle\phi|\varphi_n\rangle\right)\underbrace{\tilde{\mathcal{E}}[|\varphi_n\rangle]}_{E_n}} = \cancel{\underbrace{\langle\varphi_n|H|\phi\rangle}_{E_n} + \underbrace{\langle\phi|H|\varphi_n\rangle}_{E_n}}$$

$$\therefore \frac{d\tilde{E}}{d\lambda}[|\varphi_n\rangle] = 0$$

$\therefore$ El funcional de energía $\tilde{E}[|\psi\rangle]$ tiene puntos críticos donde $|\psi\rangle$ es un e-vector de H.

• Considerando la expansión de Taylor de $\tilde{E}[|\psi\rangle]$ alrededor de un eigenvector de H, $|\varphi_n\rangle$.

$$\tilde{E}[|\varphi_n\rangle + \lambda|\phi\rangle] = \underbrace{\tilde{E}[|\varphi_n\rangle]}_{E_n} + \cancelto{0}{\frac{d}{d\lambda}\tilde{E}[|\varphi_n\rangle]}\lambda + \frac{d^2\tilde{E}}{d\lambda^2}[|\varphi_n\rangle]\lambda^2 + \cdots$$

vector arbitrario

$\therefore$ Si cometemos un error de orden λ al estimar el eigenvector, el error en el eigenvalor es de orden λ^2.

- No solo el edo base es un punto crítico de $\tilde{E}$ sino todos los e-vectores de H.
- Para usar este método para encontrarlos debemos conocer los estados de menor energía y quitarlos del espacio de búsqueda.

$$|\Psi_{prueba}\rangle = |\psi\rangle - \langle\varphi_0|\psi\rangle|\varphi_0\rangle$$

proyección de $|\psi\rangle$ en dir. $|\varphi_0\rangle$

así
$\langle\varphi_0|\Psi_{prueba}\rangle = 0$

Veamos que con una $|\Psi_{prueba}\rangle$ de este tipo

$$\tilde{E}[|\Psi_{prueba}\rangle] \geq E_1$$

Dem

Si $\quad |\psi\rangle = \sum_{\cancel{n=0}\atop n=1} C_n |\varphi_n\rangle$

la igualdad ocurre cuando $|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle$

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_{n=1} |C_n|^2 E_n}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_1 \frac{\sum |C_n|^2}{\sum |C_n|^2} = E_1$$

$\therefore$ Si $|\psi\rangle \perp |\varphi_0\rangle \quad E[|\psi\rangle] \geq E_1$

Ejemplos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Buscamos la energía y función de onda del estado base.

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2} \qquad 1 \checkmark$$

¿Para qué valor de α $E[|\psi_\alpha\rangle]$ es mínimo?

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x)\,\psi_\alpha(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\,dx$$

$$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right] e^{-\alpha x^2}\,dx$$

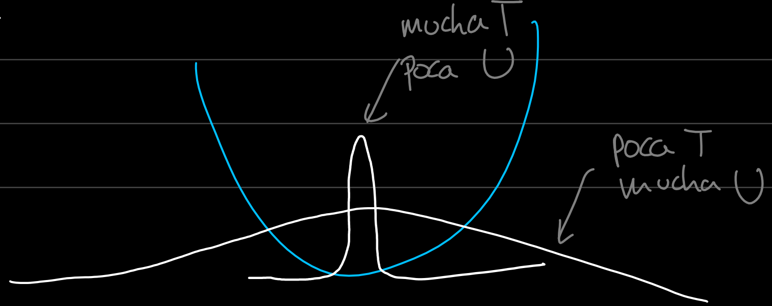
$$= \text{bla, bla, bla} = \left[\frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{1}{8} m\omega^2 \frac{1}{\alpha}\right]\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\,dx$$

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{1}{8} m\omega^2 \frac{1}{\alpha}$$

$$\frac{dE}{d\alpha}(\alpha_{min}) = 0$$

$$\alpha_{min} = \frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$E(\alpha_{min}) = \frac{1}{2}\hbar\omega$$



Ejemplo 2:

También con oscilador armónico

Buscamos la energía del estado base.

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{x^2+\alpha}$$

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2+\alpha)^2} = \frac{\pi}{2\alpha\sqrt{\alpha}}$$

$$\mathcal{E}(\alpha) = \frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2} m\omega^2 \alpha$$

$$\frac{dE}{d\alpha}(\alpha_{min}) = 0$$

$$\alpha_{min} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\mathcal{E}(\alpha_{min}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\omega$$

El error de estimación de la energía

$$\frac{\mathcal{E}(\alpha_{min}) - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\hbar\omega} = \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \approx 20\%$$

Cuánto es el error de estimación en comparación a la separación de energía entre niveles.

Ejemplo 3:

Oscilador armónico. Primer estado excitado.

$|\psi_{prueba}\rangle$ debe ser ortogonal a $|\varphi_0\rangle$

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

¿Para qué α se minimiza $\tilde{E}(\alpha)$

⋮

$\tilde{E}(\alpha_{min}) \approx E_1.$