

Problemas Método Variacional §

1. Teorema Variacional

- (a) Demostrar el *teorema variacional*
- (b) Demostrar que si $\langle \Psi | \Psi_g \rangle = 0$ (Ψ está normalizada), entonces $\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq E_1$, donde E_1 es el primer estado excitado.
- (c) ¿Qué dice el principio variacional respecto a la corrección de la energía del estado fundamental en primer orden de teoría de perturbaciones?
- (d) ¿Qué pasa entonces con la corrección en segundo orden?

2. δ Delta de Dirac

Aplicar el método variacional para resolver el problema de un potencial δ de Dirac.

- (a) Utilizar como función prueba una Gaussiana $\Psi = Ae^{-ax^2}$
- (b) Utilizar un triángulo de ancho a (a será el parámetro de variación)

3. Pozo infinito

Calcular un límite superior para la energía del estado fundamental de un pozo infinito utilizando una función triangular. ¿Podría usar una Gaussiana en este problema?

4. Oscilador armónico

- (a) Encontrar la mejor función de la forma $\Psi(x) = e^{-ax^2}$ para el estado fundamental del oscilador armónico unidimensional.
Ayuda: $\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$
- (b) Encontrar el parámetro que minimice la función $\Psi_\beta(x) = xe^{-\beta x^2}$. Explicar los resultados
- (c) Aproximar el estado fundamental del oscilador armónico unidimensional variando la función $\Psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$

5. Atomo de Hidrógeno

- (a) Utilizar la función de prueba siguiente

$$\psi_\alpha \begin{cases} C(1 - \frac{r}{\alpha}) & r \leq \alpha \\ 0 & r > \alpha \end{cases}$$

para encontrar el estado fundamental del átomo de hidrógeno. Comparar los resultados con los exactos.

- (b) Repetir el problema con una función de prueba

$$\psi_\beta = Ne^{-\beta r^2}$$

6. Oscilador anharmónico

Considerar un potencial unidimensional de la forma

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

Utilizar la función variacional

$$\Psi = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2},$$

y comparar la mejor energía obtenida para el estado fundamental con el resultado exacto ($E_0 = 1.06 \frac{\hbar^2}{2m} k^{\frac{1}{3}}$, donde $k = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}$).

§<http://www.df.uba.ar/users/dmitnik/teoricaII/variational>

7. Método Variacional Lineal

Aplicar el método variacional al problema de un electrón en una caja, de 2 a.u. de ancho, en una dimensión. Se desea construir una función variacional

$$u = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x),$$

donde

$$f_1(x) = (1 - x^2) \quad \text{y} \quad f_2(x) = (1 - x^4)$$

- (a) Calcular la energía que se obtiene aplicando el método variacional lineal
- (b) Calcular los coeficientes c_1 y c_2 que dan la mejor energía posible
- (c) Dibujar la función de onda resultante y comparar los resultados obtenidos en este ejercicio con los exactos.