



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO

---

---

FACULTAD DE INGENIERÍA

EL MÉTODO VARIACIONAL APLICADO A LA MECÁNICA  
CUÁNTICA SUPERSIMÉTRICA

T E S I S

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO FÍSICO

P R E S E N T A :

AXAYACATL HERNÁNDEZ FUENTES

Director de tesis

DR. ADOLFO HUET SOTO



QUERÉTARO, QRO.  
2022



© 2022 - Axayacatl Hernández Fuentes

All rights reserved.



*Esta tesis está dedicada a mi familia.*  
*A mi mamá por ser mi guía y estar siempre para mí.*  
*A mi hermano por su apoyo constante.*  
*A mi tío Alfonso por haber sido un guía en mi pensamiento.*



# Agradecimientos

Agradezco principalmente a mi familia por apoyarme siempre, no sólo en mis estudios sino en todos los momentos de inflexión de mi vida. En especial quisiera agradecer a mi mamá, por ser la fuente fundamental de apoyo e impulso en todos los momentos de mi vida, a mi hermano, por siempre estar presente para mí, a mis tíos y tías por su constante apoyo y sus sabios consejos.

Igualmente quiero agradecer a todos mis profesores, los cuales con su conocimiento implantaron nuevos saberes, dudas, curiosidades y pensamientos, tanto científicos como humanísticos.

Quiero extender un agradecimiento especial al Dr. Huet por estar presente en mi proceso formativo desde el inicio hasta el final, por guiarme y corregirme en cada momento que lo requerí, por todas esas tardes en las que conversaciones serias se convirtieron en risas y por todo el conocimiento que he podido obtener de él.

Asimismo deseo agradecer de todo corazón a mis profesores de matemáticas y física tanto de la secundaria como del bachillerato por ser los pilares fundamentales y artífices de mi amor hacia la bella rama de las matemáticas y las ciencias exactas.

De igual forma agradezco a mis compañeros y amigos que siempre estuvieron alentándome a seguir y superarme.

Finalmente quiero agradecer a la Universidad Autónoma de Querétaro por permitirme estudiar una carrera tan bella y convivir con seres tan maravillosos a lo largo de mi periodo formativo.





# Resumen

En este trabajo de tesis se estudian los métodos variacionales en la mecánica cuántica y en la mecánica cuántica supersimétrica. En particular se estudia la efectividad un método simple basado en el principio de incertidumbre de Heisenberg para calcular el orden de magnitud de la energía del estado base para diferentes sistemas cuánticos. Para realizar dicho análisis, se comparan los resultados obtenidos por el método variacional tradicional (método estandarizado en la literatura) con el método simple por incertidumbre (que es menos conocido).

Se introduce el concepto del modulador de incertidumbre, el cual tiene como finalidad encontrar el valor de la incertidumbre que minimiza la energía del estado base y, por ende, reduce el error que tiene el método simple por incertidumbre. Se muestra como este concepto resulta particularmente adecuado en el contexto de la mecánica cuántica supersimétrica. Se estudian sistemas tanto en una dimensión como en tres dimensiones.



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>VII</b>
<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Contents</b>	<b>XI</b>
<b>List of Figures</b>	<b>XIII</b>
<b>List of Tables</b>	<b>XV</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Método Variacional</b>	<b>5</b>
1.1. La ecuación de Schrödinger y el problema de los estados ligados . . . . .	5
1.2. Principio variacional . . . . .	7
1.2.1. Procedimiento general del método tradicional . . . . .	9
1.3. El principio de incertidumbre y el método variacional . . . . .	11
1.4. Método simple por incertidumbre . . . . .	14
<b>2. Ejemplos del método variacional en la mecánica cuántica</b>	<b>17</b>
2.1. Oscilador armónico . . . . .	17
2.1.1. Método tradicional . . . . .	17
2.1.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	19
2.2. Partícula en un campo magnético homogéneo . . . . .	21
2.2.1. Método tradicional . . . . .	22
2.2.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	24
2.3. Partícula en la caja . . . . .	25
2.3.1. Método tradicional . . . . .	25
2.3.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	28
2.4. Átomo de hidrógeno . . . . .	29
2.4.1. Método tradicional . . . . .	29
2.4.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	31
<b>3. SUSY-QM</b>	<b>35</b>
3.1. Camino a la SUSY-QM . . . . .	35
3.2. Jerarquía de hamiltonianos . . . . .	39
3.2.1. Teoría . . . . .	39
3.3. Método variacional aplicado a la SUSY-QM . . . . .	43

3.3.1. Método variacional tradicional . . . . .	43
3.3.2. Método variacional simple por incertidumbre . . . . .	44
<b>4. Ejemplos en SUSY-QM</b>	<b>47</b>
4.1. Oscilador armónico . . . . .	47
4.1.1. Método tradicional . . . . .	48
4.1.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	49
4.2. Partícula en un campo magnético homogéneo . . . . .	50
4.2.1. Método tradicional . . . . .	52
4.2.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	53
4.3. Partícula en la caja . . . . .	55
4.3.1. Método tradicional . . . . .	56
4.4. Átomo de hidrógeno . . . . .	58
4.4.1. Método tradicional . . . . .	59
4.4.2. Método simple por incertidumbre . . . . .	60
<b>5. Conclusiones</b>	<b>63</b>
<b>References</b>	<b>65</b>

# Índice de figuras

2.1.	Hamiltoniano del método tradicional, con constantes unitarias ( $\hbar = \omega = 1$ ) y el valor mínimo de la energía. . . . .	19
2.2.	Función variacional del hamiltoniano por medio de la incertidumbre con $\hbar = 1$ , $\omega = 1$ , $m = 1$ y $\kappa = 1$ . . . . .	21
2.3.	Comparación de los hamiltonianos variacionales. Además, se puede observar como los niveles de mínima energía son los mismos y concuerdan con la del estado base. . . . .	21
2.4.	Valor de la energía con respecto al valor del parámetro $b$ . . . . .	27
2.5.	Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno, donde se pueden observar tanto el mínimo de la energía obtenido por el método variacional como la energía del estado base de dicho átomo. . . . .	31
2.6.	Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno con $\kappa = 1$ . . . . .	33
4.1.	Valor esperado de la energía del hamiltoniano $H_1$ con $m = a = \hbar = 1$ variando el parámetro $b$ entre 0.1 y 2.0. . . . .	57



# Índice de tablas

2.1.	Tabla donde se presentan algunos posibles valores de $b$ , y donde se ve que el mínimo se puede encontrar entorno a 0.95 y 0.96 . . . . .	27
4.1.	Valores obtenidos para las incertidumbres, el principio de incertidumbre y las energías de los estados base de los primeros dos estados utilizando $\kappa = 1$ .	50
4.2.	Tabla donde se presentan algunos posibles valores de $b$ , y donde se ve que el mínimo se puede encontrar entorno a 0.95 . . . . .	57





---

# Introducción

La mecánica cuántica (o QM por sus siglas en inglés), que surgió a inicios del siglo pasado, es la rama de la física que centra su estudio en el análisis de los sistemas atómicos y subatómicos, tratando de describir el comportamiento como las propiedades de las partículas elementales, y de moléculas o sistemas que se encuentren a escala microscópica.

La QM es importante porque es la herramienta teórica básica para numerosas áreas de gran importancia para el conocimiento, como la química física, la física molecular, atómica y nuclear, la física de la materia condensada y del estado sólido y la física de partículas.

Ésta área del conocimiento científico ha permitido una revolución industrial, enfocándose en poder producir herramientas de escala pequeña que sean útiles en la vida cotidiana, como es el caso de la nanotecnología y de la computación cuántica [20].

La mecánica cuántica surgió de tratar de resolver el problema de la radiación del cuerpo negro, el cual trató de ser explicado por medio de la teoría clásica de la radiación. Al final, los resultados obtenidos por la teoría no coincidían con los resultados experimentales, lo que desembocó en que fuera necesario cambiar el enfoque con el que se regía la física [10]. Después de resolver este y otros problemas, como fue el efecto fotoeléctrico, la física cuántica fue tomando forma, aclarando un poco más como funcionaba el universo a escalas muy pequeñas [30], pero al avanzar el tiempo, los físicos dejaron de interesarse en casos específicos y buscaron la forma de poder describir de la mejor manera posible los sistemas cuánticos de la naturaleza. Gracias a esto surgió la mecánica cuántica, la cual permitió describir con gran precisión los fenómenos.

La QM basada en la ecuación de Schrödinger, describe la evolución de un sistema cuántico a través de cómo cambia la función de probabilidad, conocida como función de onda, en el espacio y el tiempo a partir del hamiltoniano del sistema.

La implementación de la QM generó una revolución tanto científica como industrial [2], pues se abrió la puerta a la ciencia de los materiales, lo que ha permitido que seamos capaces de comprender mejor las propiedades físicas muchas sustancias [9]. La ciencia de los materiales ha tenido un gran impacto en la electrónica, entre otras áreas.

La ecuación de Schrödinger también posibilitó el entendimiento de sistemas cuánticos que son de gran relevancia, tales como el átomo de hidrógeno, los pozos de potencial y los superconductores, entre otros.

La mecánica cuántica permitió observar que los átomos tienen un comportamiento peculiar, descrito por Bohr con su modelo atómico. Dicho comportamiento consiste en que los sistemas cuánticos únicamente pueden ser excitados con ciertos rangos energéticos. Esto

implica que la energía está discretizada, lo cual es conocido como cuantización.

Una de las tantas ventajas que la ecuación de Schrödinger trajo fue el poder calcular los niveles energéticos, tanto para átomos como para otros sistemas, los cuales se obtienen al resolver la ecuación diferencial.

La ecuación de Schrödinger tiene una limitante, ya que muy pocos sistemas cuánticos son analíticamente resolubles y nos permiten obtener resultados exactos. Por este motivo, es necesario usar diversos métodos que permitan estimar los niveles energéticos de los sistemas cuánticos, con un grado de error lo suficientemente bajo.

Los métodos de aproximación principalmente se emplean para poder encontrar la energía del estado base de estos sistemas [17]. Esto debido a que partiendo de este nivel energético podemos conocer los subsecuentes niveles.

Existen diversos métodos que permiten estimar los niveles energéticos, algunos de ellos son:

- 1 Métodos perturbativos,
- 2 Aproximación WKB,
- 3 Métodos variacionales.

Los métodos variacionales son un proceso de optimización del valor esperado de la energía del sistema [26], donde se plantea que la función de onda o el hamiltoniano dependa de una sola variable. La finalidad es optimizar la ecuación de Schrödinger o el hamiltoniano para que arroje un valor próximo al nivel energético deseado.

Otro motivo para trabajar con éstos métodos reside en que por ésta técnica de aproximación, no es necesario conocer la función de onda original [1], lo que nos permite operar con una función de onda de prueba con cualquier número de parámetros libres que vayan a ser utilizados para minimizar la energía. La función de onda de prueba debe de cumplir con las condiciones de frontera del sistema. Por ejemplo, se suele proponer que se utilicen las funciones Gaussianas para que se puedan simplificar los cálculos [14].

Estos métodos se trabajarán en la tesis y haremos una comparación entre técnicas tradicionales y la técnica propuesta para este trabajo.

Debido a la naturaleza ondulatoria y probabilística de la mecánica cuántica resultó muy complejo el poder estudiar los fenómenos de muchos cuerpos [18], por lo que fue necesario buscar una nueva forma de atacar dichos fenómenos. Esto desembocó en la teoría cuántica de campos (QFT por sus siglas en inglés), la cual es la base de la física de partículas. Ésta teoría pone en conjunción las teorías de campos clásicos, la relatividad especial y la mecánica cuántica.

Para tener modelos más simples que describieran a las partículas elementales, se desarrollaron nuevas herramientas, como las teorías supersimétricas. Estas teorías establecen una relación entre las partículas bosónicas (las que generan los campos) y fermiónicas (las responsables de la materia) [31]. Derivada de las teorías supersimétricas, se creó la mecánica cuántica supersimétrica (SUSY-QM por sus siglas en inglés), la cual se va a trabajar en esta tesis [7].

La SUSY-QM es una nueva forma de estudiar la QM, que nos permite aplicar nuevas técnicas, entre ellas la factorización del hamiltoniano. Esta técnica es de gran importancia por sus consecuencias en los sistemas cuánticos [8]. También nos permite encontrar o crear relaciones entre hamiltonianos que presentan un espectro similar [7]. Además, a través

del uso de la factorización del hamiltoniano, se puede conocer si un cierto potencial tiene solución o incluso nos permite clasificar los casos en los que los potenciales de la ecuación de Schrödinger son resolubles.

La SUSY-QM también ha permitido la expansión de los métodos variacionales, y es aquí donde entra nuestro trabajo, pues estudiaremos un método poco conocido en donde se usa como parámetro variacional el modulador de incertidumbre.

La tesis se encuentra dividida en 5 capítulos, en los cuales se tocan los siguientes temas:

El primer capítulo de este trabajo versa sobre el método variacional y cómo tradicionalmente se trabaja en la mecánica cuántica; muestra como se pueden solucionar los sistemas utilizando la definición del principio de incertidumbre; expone el procedimiento para utilizar el principio de incertidumbre de Heisenberg como una ecuación de apoyo que permite reparametrizar el hamiltoniano e introduce la idea del modulador de incertidumbre.

El segundo capítulo tiene como propósito presentar diversos sistemas cuánticos, los cuales se resuelven por los métodos variacionales tradicional (el cual es el método estandarizado al trabajar con el método variacional) y simple por incertidumbre (lo llamamos de esta manera porque se emplea al principio de incertidumbre como ecuación auxiliar en el cálculo variacional), incluyendo los cálculos de error por cada método y su comparación para vislumbrar que método variacional es más efectivo.

El tercer capítulo presenta la teoría necesaria para trabajar con la mecánica cuántica supersimétrica, especialmente el método de la jerarquía de hamiltonianos y sus consecuencias. Finalmente, se expone cómo resolver los sistemas cuánticos para cada método variacional, ahora aplicados a la SUSY-QM. Asimismo, se muestra de que manera la supersimetría afecta en la determinación del valor del modulador de incertidumbre.

El cuarto capítulo tiene como objetivo resolver algunos sistemas cuánticos supersimétricos por cada método variacional, realizar los cálculos de error que obtenemos por cada método y contrastarlos para corroborar la efectividad de cada uno. Aunado a ello, calcular un valor específico para el modulador de incertidumbre.

En el capítulo final se resumen las conclusiones a las que se llegaron a lo largo de este proyecto y una reflexión sobre la posible importancia que puede jugar el modulador de incertidumbre para la supersimetría y su posible demostración.



---

# Método Variacional

En este capítulo se trata la teoría que está detrás del principio variacional y su aplicación como método variacional, el principio de incertidumbre generalizado y la introducción de la idea del modulador de incertidumbre como optimización del método variacional simple por incertidumbre.

## 1.1. La ecuación de Schrödinger y el problema de los estados ligados

La mecánica cuántica se encuentra descrita por medio de la ecuación de Schrödinger, la cual es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi, \quad (1.1.1)$$

donde  $\psi$  es la función de onda y  $\hat{H}$  es el operador hamiltoniano, que contiene toda la información dinámica del sistema. La ecuación de Schrödinger permite conocer cómo va cambiando un estado cuántico en el tiempo. La ecuación de Schrödinger se puede resolver por el método de separación de variables, por lo que se puede escribir como el producto de dos funciones, una que dependa de la posición y otra del tiempo [3], de la siguiente manera:

$$\psi(x, t) = \phi(x)T(t). \quad (1.1.2)$$

Esto permite que la ecuación de Schrödinger se reescriba de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x)T(t) &= \hat{H} \phi(x)T(t), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x)T(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x)T(t) + V(x)\phi(x)T(t). \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

Si se dividen ambos términos de la ecuación anterior entre  $\phi(x)T(t)$ , se obtiene una ecuación en la que cada variable se encuentra de cada lado de la igualdad:

$$\boxed{\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{d}{dt} T(t) = -\frac{\hbar}{2m\phi(x)} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x) = E,} \quad (1.1.4)$$

donde  $E$  es una constante. La ecuación anterior se conoce como ecuación de Schrödinger por separación de variables. Esta ecuación es muy importante, pues permite conocer como evoluciona un estado cuántico temporalmente o espacialmente. Si se trabaja con la parte temporal se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{T(t)} \frac{d}{dt} T(t) &= E, \\ \frac{1}{T(t)} \frac{d}{dt} T(t) &= -\frac{iE}{\hbar}, \\ \frac{dT}{T} &= -\frac{iE}{\hbar} dt, \\ \therefore T(t) &= C e^{-\frac{iE}{\hbar} t}. \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

Introducir este resultado en la ecuación (1.1.2) conduce a que la función de onda se pueda expresar de la siguiente forma:

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar} t}. \quad (1.1.6)$$

Es importante notar que la constante  $C$  que aparece en la ecuación (1.1.5) se introduce en la función  $\phi(x)$ . En la ecuación (1.1.4) también se tiene la ecuación para un estado estacionario [16, 21], la cual es:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2m\phi(x)} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x) &= E, \\ -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x)\phi(x) &= E\phi(x), \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

$$\boxed{H\phi(x) = E\phi(x).}$$

Nótese que la ecuación anterior tiene la forma de un problema de eigenvalores, donde la función  $\phi(x)$  funge como la eigenfunción,  $E$  corresponde al eigenvalor y  $H$  es el operador hamiltoniano [29].

Debido a la característica del potencial de determinar el comportamiento de un sistema, existen diferentes estados que son factibles a suceder con un valor determinado de la energía en un sistema afectado por un potencial. Estos estados se conocen como estados ligados, pues están ligados en su comportamiento al potencial y en su movimiento al valor de la energía. Los estados ligados se caracterizan por las siguientes constricciones:

$$\begin{aligned} E &< V(-\infty) \\ E &< V(\infty) \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

La mayoría de los potenciales prácticos tienden a cero en el infinito, por lo que las constricciones anteriores se simplifican en una única condición.

$$E < 0. \quad (1.1.9)$$

Si el potencial del hamiltoniano genera estados ligados entonces, se obtiene un conjunto discreto de eigenfunciones y eigenvalores:

$$E_n \phi_n(x) = \hat{H} \phi_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.1.10)$$

A toda función de onda o estado  $\phi_n(x)$  que resuelve la ecuación (1.1.7) se le conoce como eigenfunción de energía [3, 11].

En un conjunto completo de eigenfunciones, existe una eigenfunción que corresponde al eigenvalor mínimo de la energía. A este eigenvalor y su eigenvector se les conoce como energía y estado base.

El estado del sistema al tiempo inicial, se puede expresar como una combinación lineal de infinitos estados ortonormales [3, 29].

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x). \quad (1.1.11)$$

De la ecuación anterior  $c_n$  es una constante, la cual se puede calcular por medio de la proyección del eigenestado  $\phi_n(x)$  sobre el estado  $\psi(x, 0)$ , de tal manera que se tiene:

$$c_n = \langle \phi_n(x) | \psi(x, 0) \rangle, \quad (1.1.12)$$

por lo que la evolución temporal del estado se puede expresar al agregar el término obtenido de la ecuación (1.1.5), lo que conduce a la siguiente expresión:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}. \quad (1.1.13)$$

El problema principal que se encuentra, es que existen muchos potenciales que cumplen con la constricción de los estados ligados, pero pocos son analíticamente resolubles, haciendo difícil el poder encontrar los eigenestados y eigenvalores que caracterizan los diversos sistemas.

Los métodos variacionales que se estudian en esta tesis permiten encontrar una aproximación a la energía del estado base cuando la solución exacta de la ecuación (1.1.10) no existe.

## 1.2. Principio variacional

Como se vio anteriormente, el principal problema que se tiene es que existen pocos potenciales que permiten resolver la ecuación de Schrödinger de forma analítica; por lo que se han desarrollado diferentes métodos que permiten estimar tanto los eigenvalores como los eigenestados de un sistema, en especial el estado base y su energía.

El *principio variacional* es uno de los métodos de aproximación utilizados en la mecánica cuántica, para estimar la energía del estado base de un sistema cuántico [4].

De la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (1.1.10), se puede ver que si se calcula el valor esperado del operador hamiltoniano, se obtiene:

$$\begin{aligned}\langle \psi | E | \psi \rangle &= \langle \psi | H | \psi \rangle, \\ E \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | H | \psi \rangle.\end{aligned}\tag{1.2.1}$$

Si se despeja  $E$ , se puede expresar la energía como un funcional, de la siguiente manera:

$$\boxed{E(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}}.\tag{1.2.2}$$

Ya que se conoce cómo se expresa la energía de un estado estacionario, es importante ver qué tanto difiere la energía de un estado variacional con la energía del estado base. Si se escribe la diferencia entre ambas energías se tiene:

$$E_v - E_0 = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - E_0 \frac{\langle \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | H - E_0 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}.\tag{1.2.3}$$

Se sabe que  $H$  contiene un espectro discreto, el cual va a arrojar un eigenvalor dependiendo del eigenestado sobre el que actúe. Por esto, es importante considerar diferentes estados. Para ello, se requiere ver la contribución que presenta cada estado al sistema, por lo que se utiliza un operador conocido como proyector ( $P_n \equiv |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ ) [24]. Los proyectores cumplen con la condición de completitud ( $\sum_n P_n = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbb{I}$ ), por lo tanto, la ecuación de Schrödinger incorporando el proyector es:

$$\sum_n H P_n | \psi \rangle = \sum_n E_n P_n | \psi \rangle.\tag{1.2.4}$$

Reemplazando lo anterior en la ecuación (1.2.3) se obtiene:

$$E_v - E_0 = \sum_n \frac{\langle \psi | H P_n - E_0 P_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n (E_n - E_0) \frac{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n (E_n - E_0) |\langle \psi | \psi_n \rangle|^2.\tag{1.2.5}$$

De la ecuación anterior, se puede ver que cada término de la suma del miembro derecho es positivo o cero, lo que nos lleva a que  $E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n$ . Por lo tanto, la diferencia  $E_v - E_0$  es positiva o cero, probando de esta manera que:

$$\begin{aligned}E_v - E_0 &\geq 0, \\ \boxed{E_v} &\geq \boxed{E_0}.\end{aligned}\tag{1.2.6}$$

Hasta el momento, se ha analizado lo que le pasa a la energía, pero también es importante ver qué le sucede a la función de onda cuando al sistema se le aplica una variación a la



función de onda del estado base. Para realizar esto, vamos a utilizar el principio de la superposición [2, 25], por lo que la función de la variación será:

$$\boxed{|\psi_v\rangle = |\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle.} \quad (1.2.7)$$

De la ecuación anterior, se puede ver una serie de cosas importantes. La primera es que la función de onda variacional debe respetar las mismas condiciones a la frontera que la función del estado base. La segunda es que la función de onda variacional lleva en su argumento el término a variar. Dicha variable en esta tesis será notada por la letra  $b$ . Cabe mencionar que cuando el sistema tiene más de una dimensión, se suelen usar más parámetros variacionales para poder estimar de forma correcta el valor esperado en cada dimensión. La tercera cosa importante es que hay un caso en el cual  $\psi_v = \psi_0$  y es cuando la variación no cambia a la función de onda.

Con todos los resultados obtenidos hasta el momento, se pueden apreciar que existen dos casos cuando aplicamos el principio variacional. Dichos casos son:

- 1  $E_v = E_0$  si y sólo si  $\psi_v = \psi_0$ ,
- 2  $E_v > E_0$  cuando  $\psi_v \neq \psi_0$ .

En resumen, el principio variacional consiste en aplicar a una función de onda de prueba o variacional ( $\psi_v$ ), la cual debe estar normalizada, el hamiltoniano de un sistema y se calcula su valor esperado, el cual será equivalente al valor de la energía variacional ( $E_v$ ).

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \langle \psi_v | \hat{H} | \psi_v \rangle = E_v. \quad (1.2.8)$$

El valor de la energía variacional debe ser mayor o igual a la energía del estado base para cumplir con el principio variacional.

$$E_v \geq E_0. \quad (1.2.9)$$

En esta tesis se trabajará tanto con el método variacional más conocido, el cual será llamado *método tradicional*, y con otro método menos conocido, el cual se basa en utilizar el principio de incertidumbre como ecuación auxiliar. A continuación se presentaran ambos métodos y su forma en la que se suele operar en cada uno.

### 1.2.1. Procedimiento general del método tradicional

El método tradicional parte de proponer una función de onda, a través de la cual se calcula el valor esperado de la energía. La función de onda variacional va a depender tanto de la posición como del parámetro variacional  $b$ , de tal forma que la función de onda tiene el siguiente aspecto:

$$\psi_v(x, b) = Af(x, b), \quad (1.2.10)$$

donde  $A$  es la amplitud de la función de onda y  $f(x, b)$  es la función matemática que caracteriza a  $\psi_v(x, b)$ . Como se puede apreciar, un elemento esencial es que la función de onda tiene que estar normalizada, razón por la cual la función de onda debe cumplir lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle \psi_v | \psi_v \rangle &= 1, \\ |A|^2 \int_{F_1}^{F_2} f^\dagger(x, b) \cdot f(x, b) dx &= 1, \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

$$\therefore A(b) = \sqrt{\frac{1}{\int_{F_1}^{F_2} f^\dagger(x, b) \cdot f(x, b) dx}},$$

donde  $F_1$  y  $F_2$  son las consideraciones a la frontera del sistema. Algo importante a observar es que al integrarse en la región del espacio constreñido por las condiciones a la frontera, la amplitud depende del parámetro variacional. Con lo anterior se puede apreciar entonces que la función de onda variacional se puede escribir de las siguientes maneras:

$$\begin{aligned} \psi_v(x, b) &= A(b)f(x, b), \\ \psi_v(x, b) &= \sqrt{\frac{1}{\int_{F_1}^{F_2} f^\dagger(x, b) \cdot f(x, b) dx}} f(x, b). \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

Una vez que la función de onda se encuentra normalizada, se procede a calcular el valor de la energía variacional, la cual se aproximará al estado base del sistema y es la descrita por la ecuación (1.2.8), además cumple el principio variacional, de tal forma que sigue la ecuación (1.2.9). Dado que se quiere encontrar el valor esperado del hamiltoniano, se debe calcular los valores esperados de la energía cinético y de la energía potencial. Dichos valores esperados corresponden a las siguientes ecuaciones:

$$\langle T \rangle = \int_{F_1}^{F_2} \psi^\dagger(x, b) \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x, b) dx = -\frac{\hbar^2 |A(b)|^2}{2m} \int_{F_1}^{F_2} f^\dagger(x, b) \frac{d^2}{dx^2} f(x, b) dx, \quad (1.2.13)$$

$$\langle V \rangle = \int_{F_1}^{F_2} \psi^\dagger(x, b) V(x) \psi(x, b) dx = |A(b)|^2 \int_{F_1}^{F_2} f^\dagger(x, b) V(x) f(x, b) dx. \quad (1.2.14)$$

De las ecuaciones anteriores, se puede observar que los valores esperados de ambas energías dependen del parámetro variacional, por lo que el valor esperado de la energía total también va a depender de dicho parámetro.

Como se sabe, el hamiltoniano corresponde a la suma de ambas energías, por lo que el valor esperado del hamiltoniano es la suma de los valores esperados tanto de la energía potencial como cinética, como se expresa a continuación.

$$\boxed{\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle.} \quad (1.2.15)$$

Si se quiere aproximar el valor esperado de la energía obtenido con cierta  $\psi_v$  a la energía del estado base, se debe minimizar la energía; pues como se sabe la energía del estado base es la energía más baja de todo el sistema. Para esto se realiza la siguiente operación:

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = 0. \quad (1.2.16)$$

Una vez que se haya realizado la minimización del valor esperado del hamiltoniano, se procede a despejar el parámetro variacional ( $b$ ), con la finalidad de encontrar el valor mínimo que puede tomar tanto éste como la función de onda y la energía del sistema.

El método admite funciones que cuenten con más de un parámetro variacional y es con respecto a ellos que se minimiza la energía.

Como se mencionó previamente, el procedimiento puede tener más de un parámetro variacional, razón por la cual se debe minimizar la energía con respecto a cada parámetro que se tenga.

Se puede apreciar el principal problema del método radica en el cálculo de las integrales para hallar los valores esperados de las energías que conforman el hamiltoniano, razón por la cual el método por incertidumbre tratará de evitar las integrales.

### 1.3. El principio de incertidumbre y el método variacional

Dada la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica, es fundamental el uso de ciertas herramientas matemáticas, tales como el valor esperado y la desviación estándar. El valor esperado permite conocer como se comporta en promedio un sistema al sufrir una medición o interacción. La desviación estándar permite saber el promedio de la variación entorno a la media, es decir, que tanto se aleja una medición del valor esperado; en mecánica cuántica la desviación estándar se le conoce como incertidumbre y se expresa de la siguiente manera [25]:

$$\Delta\Omega = \sqrt{\langle\psi|(\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle)^2|\psi\rangle} = \sqrt{\langle f|f\rangle}, \quad (1.3.1)$$

donde  $\Omega$  es un operador hermítico que representa alguna observable física y  $|f\rangle = (\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle)|\psi\rangle$ . Usualmente tanto el valor esperado como la incertidumbre permiten conocer de buena manera la configuración de un estado cuántico.

Hasta el momento sólo se ha prestado atención a las consecuencias de una medición, pero generalmente, se tratan de realizar más de una con la finalidad de extraer la mayor cantidad de información posible del sistema. Se debe analizar lo que sucede cuando se hace más de una medición sucesiva sobre el mismo sistema. Para ello consideremos otra observable  $\Lambda$  y el estado  $|g\rangle = (\hat{\Lambda} - \langle\Lambda\rangle)|\psi\rangle$ . Para realizar mediciones sucesivas se tienen que multiplicar las varianzas (incertidumbre cuadradas) de ambos estados.

Si los operadores  $\hat{\Omega}$  y  $\hat{\Lambda}$  no conmutan entre sí, entonces se puede escribir una relación entre ellos por medio de la desigualdad de Schwartz ( $\langle V_1 \rangle^2 \langle V_2 \rangle^2 \geq |\langle V_1 V_2 \rangle|^2$ ), de tal forma que se consigue lo siguiente:

$$\Delta\Omega^2 \Delta\Lambda^2 \geq |\langle f|g\rangle|^2. \quad (1.3.2)$$

A continuación, se utilizan las siguientes propiedades de los números complejos:

$$|z| \geq |\text{Im}(z)|, \quad (1.3.3)$$

$$\text{Im}(z) = \frac{z - \bar{z}}{2i}. \quad (1.3.4)$$

Si se define el número complejo  $z$  como  $z \equiv \langle f|g \rangle$ , entonces, su complejo conjugado es  $\bar{z} = \langle g|f \rangle$ . Por lo tanto sustituyendo esto en la ecuación (1.3.2) se obtiene:

$$\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq |z|^2. \quad (1.3.5)$$

Usando la propiedad de la ecuación (1.3.3) resulta por secuencia lógica la siguiente relación entre la varianza y el módulo de la parte imaginaria de un número complejo:

$$\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq |z|^2 \geq |Im(z)|^2 \therefore \boxed{\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq |Im(z)|^2}. \quad (1.3.6)$$

Ahora, si se utiliza la propiedad de la ecuación (1.3.4) se puede describir la varianza en términos del número complejo  $z$ , y por consiguiente con la relación entre los operadores:

$$\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq \left| \frac{z - \bar{z}}{2i} \right|^2 \implies \boxed{\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq \left| \frac{\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle}{2i} \right|^2}. \quad (1.3.7)$$

Si se sustituyen las definiciones de  $\langle f|g \rangle$  y de  $\langle g|f \rangle$  y se realizan las operaciones correspondientes, se obtienen las siguientes expresiones:

$$\langle f|g \rangle = \langle \hat{\Omega}\hat{\Lambda} \rangle - \langle \Omega \rangle \langle \Lambda \rangle, \quad (1.3.8)$$

$$\langle g|f \rangle = \langle \hat{\Lambda}\hat{\Omega} \rangle - \langle \Omega \rangle \langle \Lambda \rangle, \quad (1.3.9)$$

$$\therefore \langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle = \langle [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] \rangle. \quad (1.3.10)$$

Sustituyendo el resultado de la ecuación (1.3.10) en la ecuación (1.3.7) se puede simplificar ésta última de la siguiente forma:

$$\Delta\Omega^2\Delta\Lambda^2 \geq \left| \frac{\langle [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] \rangle}{2i} \right|^2, \quad (1.3.11)$$

por lo que la relación de incertidumbre que existe entre dos operadores hermíticos cualquiera queda de la siguiente manera:

$$\boxed{\Delta\Omega\Delta\Lambda \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] \rangle \right|}. \quad (1.3.12)$$

Ésta última relación es conocida como **principio de incertidumbre generalizado** y establece que existe una relación entre las incertidumbres de los operadores y el valor absoluto del conmutador de dichos operadores. Esto es de gran importancia pues el conmutador nos permite saber si los observables son compatibles o incompatibles, lo que nos deja saber a la vez si cuentan o no con un conjunto completo de eigenestados en común.

El caso más conocido del principio de incertidumbre es aquel donde se cuentan con los operadores canónicos  $(\hat{x}, \hat{p})$  que se expresa de la siguiente manera:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.3.13)$$

Existe un método variacional que se basa en el principio de incertidumbre. Recuérdese que  $\Delta x$  y  $\Delta p$  se calculan para un estado fijo  $|\Phi\rangle$  y por lo tanto el producto  $\Delta x \Delta p$  tendrá diferentes valores para diferentes estados.

Deberá existir un cierto estado  $|\Phi_0\rangle$ , tal que la incertidumbre total se minimiza y se obtiene la igualdad en (1.3.13). A los estados que cumplen con lo anterior se les conoce como estados de mínima incertidumbre. Se puede demostrar que las funciones de onda de mínima incertidumbre son de forma gaussiana y se escriben de la siguiente manera:

$$|\Phi_0\rangle = \left( \frac{1}{2\pi(\Delta x)^2} \right)^{1/4} e^{\frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}} e^{-\left( \frac{x - \langle x \rangle}{2\Delta x} \right)^2} \quad (1.3.14)$$

Algo importante a resaltar, es que el método variacional por incertidumbre nos permite encontrar los estados coherentes de un sistema cuántico. Esto se debe a que los estados coherentes son estados de mínima incertidumbre [28], es decir, el estado  $|\Phi_0\rangle$  es un estado coherente. Los estados coherentes se encuentran relacionados con el estado base por medio del operador de desplazamiento  $\hat{D}(\alpha)$  de la siguiente manera.

$$|\Phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha)|\psi_0\rangle. \quad (1.3.15)$$

Utilizando en la ecuación anterior, el hecho de que el operador desplazamiento se encuentra definido como  $\hat{D}(\alpha) = e^{\frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}}$ , entonces podemos ver que el estado base de un sistema cuántico se encuentra caracterizado de la siguiente manera:

$$|\Phi_0\rangle = \hat{D}(\alpha)|\psi_0\rangle = \left( \frac{1}{2\pi(\Delta x)^2} \right)^{1/4} e^{\frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}} e^{-\left( \frac{x - \langle x \rangle}{2\Delta x} \right)^2}, \quad (1.3.16)$$

$$\boxed{\therefore |\psi_0\rangle = \left( \frac{1}{2\pi(\Delta x)^2} \right)^{1/4} e^{-\left( \frac{x - \langle x \rangle}{2\Delta x} \right)^2}.}$$

Por lo anterior, se puede construir una función variacional que minimice la incertidumbre. Para generar una función de onda variacional que respete todo lo anteriormente mencionado, en el trabajo, se propondrá que la función que combine las ideas de las ecuaciones (1.2.12) y (1.3.16). Esto conduce a que la función variacional sea del siguiente tipo.

$$\psi_v(x, b) = A(b)f(x, b)e^{-b(x - \langle x \rangle)^2}, \quad (1.3.17)$$

donde  $A(b)$  es la constante de normalización del estado. Por su parte,  $f(x, b)$  es una función que restringe al estado para que cumpla las condiciones de frontera, que se puede añadir para cumplir condiciones de frontera especiales (para las condiciones de frontera usuales en  $\pm\infty$  se utiliza  $f(x, b) = 1$ ).

Por ejemplo, una función sencilla es la siguiente:

$$\boxed{\psi_v(x, b) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-b(x-a)^2}.} \quad (1.3.18)$$

Esta función es una de las que utilizaremos en esta tesis.

Si se comparan las ecuaciones (1.3.16) y (1.3.18) se puede encontrar una correlación entre nuestro parámetro variacional  $b$  y la incertidumbre en la posición  $\Delta x$  y dicha relación es:

$$\Delta x = \frac{1}{2\sqrt{b}}. \quad (1.3.19)$$

Si se introduce el resultado anterior en el principio de incertidumbre para un estado de mínima incertidumbre, se obtiene que la incertidumbre del momento es:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \implies \Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x} \quad \therefore \quad \Delta p = \sqrt{b\hbar}. \quad (1.3.20)$$

Las relaciones obtenidas en las ecuaciones (1.3.19) y (1.3.20) son importantes, porque relacionan los valores de las incertidumbres con el parámetro variacional  $b$ . Es importante decir que dichas relaciones son exclusivamente para aquellos estados que estén descritos por la función variacional estándar (ecuación (1.3.18)). Si se va a utilizar otra función, entonces se tendrán que calcular sus valores esperados y de allí encontrar la relación entre el parámetro variacional  $b$  y las incertidumbres.

Ya que se conoce una función de onda variacional, la cual se aproxima al estado base, simplemente se procede a calcular el valor esperado de la energía como lo indican las ecuaciones (1.2.15) y (1.2.16) ajustando el valor de  $b$  que minimiza el valor esperado de la energía. Una vez que se obtenga el valor del parámetro variacional, se podrá calcular tanto la energía mínima como los valores de las incertidumbres.

Este procedimiento aproxima el valor de la energía del estado base del sistema. La calidad de la aproximación dependerá de la similitud entre el estado base exacto y la forma gaussiana propuesta.

En esta tesis aplicamos este método para resolver el sistema de la partícula en la caja (pozo de potencial infinito) y hacemos un comparativo con otros métodos.

## 1.4. Método simple por incertidumbre

Como se ha visto en la sección anterior, es factible utilizar el principio de incertidumbre para conocer la función de onda que mejor se adapte a la incertidumbre que posee dicho sistema cuántico.

Sin embargo, se pueden aprovechar las propiedades algebraicas del principio de incertidumbre para obtener una estimación de la energía del estado base sin necesidad de trabajar con funciones variacionales y sin calcular valores esperados, tal y como se demuestra a continuación [22, 25].

Para utilizar todo el potencial que tiene este método, vamos a utilizar la generalización de la incertidumbre del momento y posición, la cual es:

$$p_i x_j \geq \delta_{ij} \frac{\hbar}{2}. \quad (1.4.1)$$

Algo importante a notar es que no todos los sistemas cuánticos tienen como incertidumbre el valor de  $\frac{\hbar}{2}$ , sino que todos los sistemas tienen una incertidumbre proporcional de  $\frac{\hbar}{2}$ ; lo que permite generar la siguiente ecuación, la cual respeta el principio de incertidumbre:

$$p_i x_i = \frac{\varkappa_i \hbar}{2}, \quad \varkappa_i \geq 1, \quad (1.4.2)$$

donde  $\varkappa$  (letra zhe del alfabeto cirílico) es la constante que modula la incertidumbre de un sistema cuántico particular; razón por la cual se referirá a dicha constante como el *modulador de incertidumbre*, y como se ve, es una constante igual o mayor a uno, con lo que se consigue respetar el principio de incertidumbre de Heisenberg.

El hamiltoniano incorpora tanto el momento como la posición, lo que permite utilizar el principio de incertidumbre para reparametrizar el hamiltoniano y que quede descrito en términos de posición o momento exclusivamente. Para poder hacer esto simplemente se tiene que despejar la ecuación anterior. Por lo general, se describirá en términos de posición, de tal forma que se obtiene:

$$p_i = \frac{\varkappa_i \hbar}{2x_i}, \quad \varkappa_i \geq 1. \quad (1.4.3)$$

Esta última ecuación permite hacer sustituciones en nuestro hamiltoniano, generando una forma de factorizarlo, por lo que para un caso general, se obtiene que el hamiltoniano tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{p^2}{2m} + V(x), \\ &= \frac{1}{2m} \left( \frac{\varkappa \hbar}{2x} \right)^2 + V(x), \\ \therefore \hat{H} &= \frac{\varkappa^2 \hbar^2}{8mx^2} + V(x). \end{aligned} \quad (1.4.4)$$

El resultado anterior genera la energía de cualquier sistema cuántico en cualquier estado. Ahora, para realizar que dicha energía tienda a ser la energía del estado base, hay encontrar el mínimo de nuestra función hamiltoniano, por lo que para una dimensión tenemos lo siguiente:

$$\frac{d}{dx} \hat{H} = 0. \quad (1.4.5)$$

Sustituyendo (1.4.4) en la ecuación anterior se obtiene que:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dx} \left( \frac{\varkappa^2 \hbar^2}{8mx^2} + V(x) \right), \\ \implies 0 &= -\frac{\varkappa^2 \hbar^2}{4mx^3} + \frac{d}{dx} V(x). \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

Una vez que se conozca el potencial, se procede a derivar y luego se realiza un despeje para encontrar el valor de  $x$  que minimiza la energía. Ya que sea conocido dicho valor, se procede a sustituirlo en nuestro hamiltoniano inicial y de allí, se procede a calcular el valor que tendrá la energía de variación ( $E_v$ ) en términos del modulador de incertidumbre. Comparando con la energía del estado base, podremos encontrar que valor de  $\kappa$  minimiza la energía y a la vez podremos encontrar cual es el valor de la incertidumbre para dicho sistema cuántico.

Este procedimiento se puede generalizar después a más dimensiones, pero hay que tener en cuenta la consideración de la ecuación (1.4.1) para poder aplicar bien el método variacional.

Debido a que no se conoce el valor de  $\kappa$  que minimiza la energía y se sabe que el valor más bajo que puede tomar es  $\kappa = 1$ , se va a fijar el modulador a dicho valor. Las expresiones que contienen un valor indeterminado de  $\kappa$  serán relevantes más adelante, cuando se trate la SUSY-QM. Se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$H = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + V(x), \quad (1.4.7)$$

$$0 = -\frac{\hbar^2}{4mx^3} + \frac{d}{dx}V(x). \quad (1.4.8)$$

Tal y como se mencionó, la ventaja principal que se obtiene al trabajar por este método es que ya no se requiere resolver integrales.

Para calcular la energía del estado base (en forma aproximada), se despeja  $x$  de la ecuación (1.4.8) y luego lo se sustituye en la ecuación (1.4.7).

Es importante hacer notar que este método ayuda a estimar el orden de magnitud de la energía.

Además, este método se ha utilizado en algunos trabajos como "Variational Constraints of Masses and Radii of  $c$  Mesons, Jamil Ahmed, Rahila Manzoor, Alfredo Raya, Quant. Phys. Lett. 6, 99" y "A new variational approach and its implications to heavy quarkonia, Jamil Ahmed, Rahila Manzoor y Alfredo Raya. Rev. Mex. Fis. 67(1) 33-53 (2021)".



# Ejemplos del método variacional en la mecánica cuántica

Este capítulo se enfocará en resolver diferentes sistemas cuánticos. Se va a calcular el valor de la energía del estado base de dichos sistemas por medio de los dos diferentes métodos variacionales, el tradicional y el método simple por incertidumbre. Además, se realizará una comparación de los resultados obtenidos por ambos métodos para cada caso tratado.

## 2.1. Oscilador armónico

Este problema es fundamental, debido a que es uno de los problemas que cuentan con solución exacta. Además, el sistema es soluble por diferentes métodos.

El hamiltoniano de este sistema es el siguiente:

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (2.1.1)$$

en donde  $\omega$  es un parámetro que representa la frecuencia clásica de las oscilaciones.

### 2.1.1. Método tradicional

Como se sabe, para trabajar este método se tiene que encontrar los valores esperados de la energía tanto cinética como potencial. Para esto, se utiliza la función de onda variacional estándar (1.3.18) centrada en el origen ( $a = 0$ ).

El valor esperado para la energía cinética es:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \langle \psi_v | T | \psi_v \rangle, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-bx^2} dx, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} 2be^{-2bx^2} (2bx^2 - 1) dx, \\ &= \frac{\hbar^2 b}{2m}. \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Ahora, calculando el valor esperado para la energía potencial,

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \langle \psi_v | V | \psi_v \rangle, \\
 &= \frac{m\omega^2}{2} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} x^2 e^{-bx^2} dx, \\
 &= \frac{m\omega^2}{8b},
 \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

por lo que el valor esperado del hamiltoniano es:

$$\boxed{\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b}}. \tag{2.1.4}$$

Como se puede apreciar, el hamiltoniano sólo depende de una variable, la cual es  $b$ , pero para encontrar el mínimo de nuestra función es necesario optimizarla. Para ello se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle H \rangle}{db} &= 0, \\
 \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2} &= 0, \\
 \therefore b &= \frac{m\omega}{2\hbar}.
 \end{aligned} \tag{2.1.5}$$

A partir del valor obtenido previamente para el parámetro  $b$ , la función de onda variacional resulta:

$$\boxed{\psi_{vmin} = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}. \tag{2.1.6}$$

En este caso, el cálculo variacional produce exactamente el estado base del oscilador armónico.

Si se sustituye el resultado de la ecuación (2.1.5) en la ecuación (2.1.4) se obtiene que el valor esperado de la energía para el estado base es:

$$\langle H \rangle_{min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right) + \frac{m\omega^2}{8} \left( \frac{2\hbar}{m\omega} \right) = \boxed{\frac{\hbar\omega}{2}}. \tag{2.1.7}$$

La energía obtenida por el método variacional tradicional arroja exactamente la misma energía que la solución exacta.

Además, haciendo uso de las ecuaciones que relacionan la incertidumbre con el parámetro variacional  $b$ , se pueden calcular el valor de las incertidumbres (1.3.19) y (1.3.20). Dichos valores son:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}. \tag{2.1.8}$$

Ahora, se procede a graficar el hamiltoniano en función del parámetro variacional como se muestra en la Figura 2.1, para observar como se comporta la energía.

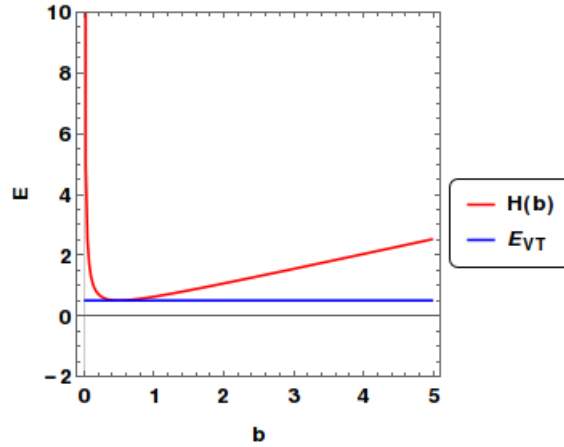


Figura 2.1: Hamiltoniano del método tradicional, con constantes unitarias ( $\hbar = \omega = 1$ ) y el valor mínimo de la energía.

Se procede a calcular el error del sistema:

$$\epsilon = \left( \frac{E_0 - E_V}{E_0} \right) 100\% = \left( \frac{\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}}{\frac{\hbar\omega}{2}} \right) = 0\%. \quad (2.1.9)$$

### 2.1.2. Método simple por incertidumbre

Para este problema, se sabe que el potencial es:

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (2.1.10)$$

Entonces, si se deriva el potencial se obtiene:

$$\frac{d}{dx} V(x) = m\omega^2 x. \quad (2.1.11)$$

Ahora, sustituyendo el resultado anterior en el segundo miembro de la ecuación (1.4.6) y dado que se tiene que  $\kappa = 1$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\kappa^2 \hbar^2}{4mx^3} &= m\omega^2 x, \\ \implies \frac{\hbar^2}{4\omega^2 m^2} &= x^4, \\ \implies x^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}, \\ \therefore x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

Remplazando el valor de  $x$  en el hamiltoniano, resulta lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \\
 &= \frac{\hbar^2}{8m \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)} + \frac{m\omega^2 \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)}{2}, \\
 &= \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4},
 \end{aligned} \tag{2.1.13}$$

$$\boxed{\therefore E_v = \frac{\hbar\omega}{2}.}$$

Ahora, haciendo uso de la ecuación (1.4.3), se pueden encontrar los valores de las incertidumbres tanto del momento como del sistema. Los valores anteriormente mencionados son:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \tag{2.1.14}$$

$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}, \tag{2.1.15}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \tag{2.1.16}$$

$$E_v = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{2.1.17}$$

Como se puede apreciar en el resultado anterior, el error obtenido entre la energía variacional y la del estado base teórico del sistema es de 0% con  $\kappa = 1$ . El hamiltoniano del sistema es:

$$\boxed{H = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.} \tag{2.1.18}$$

Con éste último hamiltoniano, el cual se encuentra en términos de una única variable, se puede proceder a graficar para ver el comportamiento de la energía con respecto a la posición.

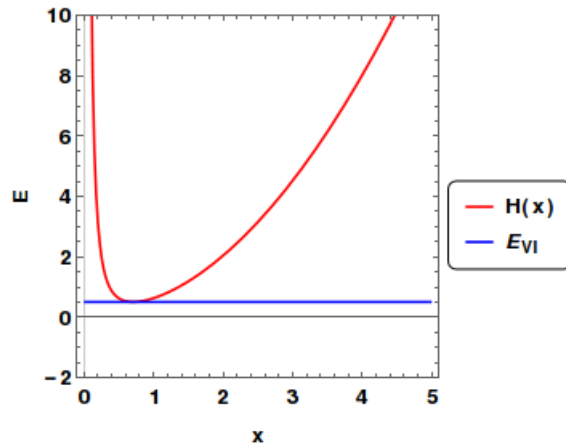


Figura 2.2: Función variacional del hamiltoniano por medio de la incertidumbre con  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $m = 1$  y  $\kappa = 1$ .

Ahora, como último ejercicio, se comparan ambos hamiltonianos variacionales y se obtiene como resultado la Figura 2.3, y por el cual se puede apreciar la gran diferencia que aparece entre ambos gracias a la diferencia del potencial.

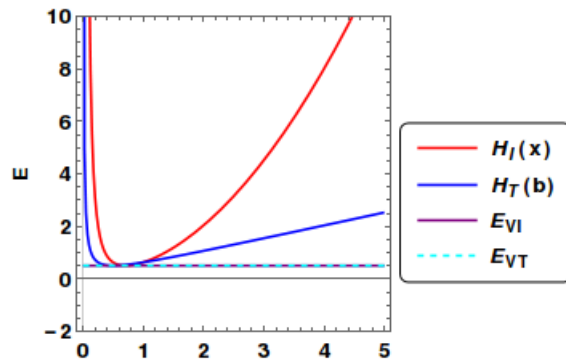


Figura 2.3: Comparación de los hamiltonianos variacionales. Además, se puede observar como los niveles de mínima energía son los mismos y concuerdan con la del estado base.

## 2.2. Partícula en un campo magnético homogéneo

El problema de la partícula en un campo magnético homogéneo es notable porque puede reducirse matemáticamente a osciladores armónicos siguiendo el método llamado *cuantización de Landau*.

En este problema el potencial vectorial determina la forma del hamiltoniano. Se va a considerar el siguiente potencial que produce un campo magnético homogéneo:

$$\vec{A} = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \implies \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = B\hat{z}. \quad (2.2.1)$$

Haciendo la sustitución mínima [7] en el hamiltoniano del sistema se obtiene:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} \hat{A}_i \right)^2 = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x - \frac{e}{c} \hat{A}_x \right)^2 + \left( \hat{p}_y - \frac{e}{c} \hat{A}_y \right)^2 + \left( \hat{p}_z - \frac{e}{c} \hat{A}_z \right)^2 \right]. \quad (2.2.2)$$

Si sustituyen las componentes del potencial vectorial magnético en sus correspondientes posiciones se tiene:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \left( \hat{p}_y - \frac{eB}{2c} x \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right]. \quad (2.2.3)$$

Prestando atención en la forma en que quedan los potenciales, se logra apreciar que se pueden utilizar la frecuencia del ciclotrón ( $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ ) para simplificar los cálculos; lo cual permite tener el hamiltoniano expresado de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{m\omega_c}{2} \hat{y} \right)^2 + \left( \hat{p}_y - \frac{m\omega_c}{2} \hat{x} \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right]. \quad (2.2.4)$$

A continuación, se expanden los binomios al cuadrado y saca el término de  $p_z^2$  fuera de los corchetes, obteniendo de esta manera lo siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x^2 + \frac{m\omega_c}{2} (\hat{p}_x \hat{y} + \hat{y} \hat{p}_x) + \frac{m^2 \omega_c^2}{4} \hat{y}^2 \right) + \left( \hat{p}_y^2 - \frac{m\omega_c}{2} (\hat{p}_y \hat{x} + \hat{x} \hat{p}_y) + \frac{m^2 \omega_c^2}{4} \hat{x}^2 \right) \right] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \\ \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \frac{m\omega_c}{2} [(\hat{p}_x \hat{y} + \hat{y} \hat{p}_x) - (\hat{p}_y \hat{x} + \hat{x} \hat{p}_y)] + \frac{m^2 \omega_c^2}{4} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Utilizando la siguiente relación que existe entre el conmutador y el anticonmutador ( $[\hat{A}, \hat{B}] = \{\hat{A}, \hat{B}\} - 2\hat{B}\hat{A}$ ) y la relación del conmutador entre momento y posición ( $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \delta_{i,j} i\hbar$ ), se puede simplificar el hamiltoniano anterior, obteniendo la siguiente expresión:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 - m\omega_c (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) + \frac{m^2 \omega_c^2}{4} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (2.2.6)$$

Este último hamiltoniano será con el que se trabajará. Cabe mencionar que el término  $\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$  es en realidad  $L_z$ , lo que permitiría utilizar las coordenadas cilíndricas.

### 2.2.1. Método tradicional

Como se puede apreciar en la ecuación (2.2.6) el hamiltoniano cuenta con aportaciones en las tres dimensiones cartesianas, por lo que la función de onda que se proponga deberá incluir las tres dimensiones, por lo que la función de onda gaussiana quedará de la siguiente manera:

$$\psi_v(x, y, z) = A e^{-(ax^2 + by^2 + cz^2)}, \quad (2.2.7)$$

donde la constante de normalización A es:

$$A = \left( \frac{2^3 abc}{\pi^3} \right)^{1/4}. \quad (2.2.8)$$

Ya que se cuenta con la función de onda del sistema normalizada, se puede proceder a calcular el valor esperado de la energía cinética del sistema. Se tienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \langle \psi_v | T | \psi_v \rangle, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\omega_c \hbar}{2i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} dv, \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c). \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Ahora, calculando el valor esperado de la energía potencial del sistema se tiene:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \langle \psi_v | V | \psi_v \rangle, \\ &= \frac{m\omega_c^2}{8} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} (x^2 + y^2) e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} dv, \\ &= \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right), \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

por lo que se obtiene que el valor esperado de la energía sea:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle T \rangle + \langle V \rangle, \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right). \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

Ahora, se procede a minimizar la energía con respecto a cada uno de los parámetros. Se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial a} &= 0 = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega_c^2}{32a^2}, \\ a^2 &= \frac{m^2 \omega_c^2}{16\hbar^2}, \\ \therefore a &= \frac{m\omega_c}{4\hbar}. \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial b} &= 0 = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega_c^2}{32b^2}, \\ b^2 &= \frac{m^2 \omega_c^2}{16\hbar^2}, \\ \therefore b &= \frac{m\omega_c}{4\hbar} \implies \boxed{a = b}. \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial c} = 0 = \frac{\hbar^2}{2m}, \quad (2.2.14)$$

$\therefore c = \text{constante}.$

Debido a que el movimiento en  $z$  no cuenta con un potencial, el movimiento en dicha dirección corresponde al de una partícula libre. Se sabe que el valor esperado de la energía de una partícula libre en dirección  $z$  es  $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ . Con ésto y el valor esperado de la energía cinética en dirección  $z$ , el cual corresponde al término que contiene a  $c$  en el hamiltoniano (2.2.11), se puede conocer el valor de  $c$  por medio de la siguiente expresión.

$$\frac{\hbar^2 c}{2m} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \implies c = k_z^2. \quad (2.2.15)$$

Sustituyendo el resultado anterior y los valores esperados obtenidos en las ecuaciones (2.2.12) y (2.2.13) se obtiene que la energía mínima esperada es:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right), \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{m\omega_c}{2\hbar} + k_z^2 \right) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{8\hbar}{m\omega_c} \right), \\ &= \frac{\hbar\omega_c}{4} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_c}{4}, \\ \therefore \langle E \rangle &= \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

El resultado anterior coincide perfectamente con el resultado exacto, por lo que el error que se obtiene es del 0%.

### 2.2.2. Método simple por incertidumbre

Se va a partir de la ecuación (2.2.6), pero se realizará una pequeña consideración, la cual es una consideración simétrica que se presentará en el plano XY, de tal forma que  $x = y$ . Esto simplifica el hamiltoniano anterior dicho, de la siguiente manera:

$$H = \frac{1}{2m} \left( 2p_x^2 + \frac{m^2 \omega_c^2 x^2}{2} + p_z^2 \right). \quad (2.2.17)$$

Se puede apreciar que este hamiltoniano es mucho más simple y fácil de manejar. Ahora utilizando el principio de incertidumbre para dejar el hamiltoniano en término de las coordenadas espaciales en el plano XY y en términos del vector de onda en la dirección  $z$ , se obtiene lo siguiente:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar^2}{2x^2} + \frac{m^2 \omega_c^2 x^2}{2} + \hbar^2 k_z^2 \right). \quad (2.2.18)$$

Ahora se procede a minimizar la energía con respecto a las variables:



$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial x} = 0 &= -\frac{\hbar^2}{x^3} + m^2\omega_c^2 x, \\
x^4 &= \frac{\hbar^2}{m^2\omega_c^2}, \\
x^2 &= \frac{\hbar}{m\omega_c}, \\
\therefore x &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}.
\end{aligned} \tag{2.2.19}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial k_z} = 0 &= 2\hbar k_z, \\
\therefore k_z = 0 &\implies k_z = \text{constante}.
\end{aligned} \tag{2.2.20}$$

Sustituyendo estos valores calculados en el hamiltoniano de la ecuación (2.2.18) se obtiene que el valor mínimo de la energía es:

$$\begin{aligned}
E_v &= \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar^2}{2x^2} + \frac{m^2\omega_c^2 x^2}{2} + \hbar^2 k_z^2 \right], \\
E_v &= \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{m\omega_c}{\hbar} \right) + \frac{m^2\omega_c^2}{2} \left( \frac{\hbar}{m\omega_c} \right) + \hbar^2 k_z^2 \right], \\
E_v &= \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar m\omega_c}{2} + \frac{m\omega_c \hbar}{2} + \hbar^2 k_z^2 \right), \\
\therefore E_v &= \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.
\end{aligned} \tag{2.2.21}$$

Como se puede observar, el valor mínimo de la energía es exactamente igual a la energía que se ha estimado de la forma teórica y con el método variacional tradicional.

Como se puede apreciar, en ambos resultados variacionales, se obtiene la energía teórica, y esto es debido a que el hamiltoniano del sistema en realidad es una combinación de dos hamiltonianos que son calculables, los cuales son el de la partícula libre y el del oscilador armónico.

## 2.3. Partícula en la caja

Este ejemplo es de vital importancia en la mecánica cuántica, porque es uno de los principales ejemplos donde se pueden aplicar los pozos de potencial.

Para solucionar este problema se realizó una aproximación numérica, para ambos casos.

### 2.3.1. Método tradicional

Debido a la existencia de las condiciones de frontera, la función variacional no será la función estándar, sino que será una función que siga la ecuación (1.3.17).

Para la función de onda se tiene que  $f(x, b) = x(x-a)$ , para que cumpla con las condiciones de frontera. Además, se tendrá la onda centrada en la mitad de la caja, por lo que  $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$ . Lo que hace que la función de onda variacional sea la siguiente.

$$\psi_v(x) = Ax(x-a)e^{-b(x-\frac{a}{2})^2}. \quad (2.3.1)$$

Se procede a calcular el valor de la constante de normalización  $A$ .

$$\langle \psi_v | \psi_v \rangle = 1. \quad (2.3.2)$$

Al hacer éste cálculo, se obtiene que la constante es:

$$A = -\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{-\frac{6ae^{-\frac{a^2b}{2}}}{b^2} + \frac{2a^3e^{-\frac{a^2b}{2}}}{b} + \frac{3\sqrt{2\pi}Erf\left[\frac{a\sqrt{b}}{\sqrt{2}}\right]}{b^{5/2}} - \frac{2a^2\sqrt{2\pi}Erf\left[\frac{a\sqrt{b}}{\sqrt{2}}\right]}{b^{3/2}} + \frac{a^4\sqrt{2\pi}Erf\left[\frac{a\sqrt{b}}{\sqrt{2}}\right]}{b^{1/2}}}}. \quad (2.3.3)$$

Como se puede apreciar, la constante de normalización depende del parámetro variacional  $b$ . Además, dentro de la constante de normalización se encuentra la función error ( $Erf(x)$ ), la cual se encuentra ampliamente ligada a la teoría de la probabilidad, la cual se define como:

$$Erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt \quad \implies \quad Erf\left[\frac{a\sqrt{b}}{\sqrt{2}}\right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{a\sqrt{b}}{\sqrt{2}}} e^{-t^2} dt. \quad (2.3.4)$$

Ahora, se prosigue a calcular el valor esperado de la energía; pero gracias a que el potencial es cero dentro de la caja, se puede reducir todo a lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle T \rangle, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \psi_v(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_v(x) dx. \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

Se obtuvo el valor de  $b$  que minimiza la energía de forma numérica. Para este análisis numérico se considera una caja de longitud  $a = 1$  y la masa de la partícula también es unitaria. Luego, se fue variando el valor del parámetro  $b$  dentro del hamiltoniano, para de esta forma ir estimando el valor de la energía con un valor específico de  $b$ . Finalmente, se graficaron los valores energéticos hasta encontrar aquel valor donde la energía se minimiza. A continuación, se presenta la gráfica donde se ve la variación de la energía con respecto al parámetro  $b$ .

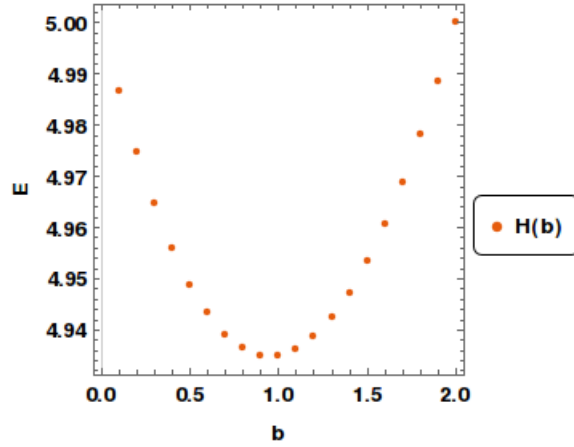


Figura 2.4: Valor de la energía con respecto al valor del parámetro  $b$ .

Como se puede observar en el gráfico anterior, el mínimo de la energía se encuentra en la región entre 0.9 y 1. Mientras más cifras significativas se empleen en el valor del parámetro, menor será el error que se pueda encontrar; este procedimiento se puede realizar cuantas veces sea necesario. Para dos cifras significativas tenemos los siguientes valores:

$b$	$\langle E \rangle$
0.9	$4.93501\hbar^2$
0.91	$4.93494\hbar^2$
0.92	$4.93489\hbar^2$
0.93	$4.93485\hbar^2$
0.94	$4.93483\hbar^2$
0.95	$4.93481\hbar^2$
0.96	$4.93481\hbar^2$
0.97	$4.93483\hbar^2$
0.98	$4.93486\hbar^2$
0.99	$4.9349\hbar^2$
1.	$4.93495\hbar^2$

Tabla 2.1: Tabla donde se presentan algunos posibles valores de  $b$ , y donde se ve que el mínimo se puede encontrar entorno a 0.95 y 0.96

Como se puede apreciar en la Tabla 2.1, el mínimo de la energía se encuentra en la región entre 0.95 y 0.96. Al ir haciendo cada vez más fino el valor que vaya tomando el parámetro  $b$ , más se aproximará al valor real. Para el caso en el que se tienen 4 cifras significativas para el valor de  $b$ , el mínimo se encuentra en el valor de  $b = 0.9541$ , y el valor que de la energía resulta:

$$E_v = 4.93481\hbar^2. \quad (2.3.6)$$

El valor exacto de la energía es:

$$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2} \approx 4.93480\hbar^2, \quad (2.3.7)$$

lo que genera un error de:

$$\epsilon = \left( \frac{E_0 - E_v}{E_0} \right) 100 \% = 0.001 \%. \quad (2.3.8)$$

Este resultado permite observar que el método es bastante efectivo para este problema; aunque hay que resolverlo numéricamente.

Ya que se conoce el valor que tiene el parámetro variacional  $b$ , se puede encontrar el valor tanto de la incertidumbre de la posición como del momento y de esta manera calcular la incertidumbre total.

Es menester recordar que para calcular las incertidumbres, primero es necesario calcular los siguientes valores esperados:

$$\langle x \rangle = \int_0^a \psi_v(x) x \psi_v(x) dx = 0.5, \quad (2.3.9)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a \psi_v(x) x^2 \psi_v(x) dx = 0.282675, \quad (2.3.10)$$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_0^a \psi_v(x) \frac{d}{dx} \psi_v(x) dx = 0, \quad (2.3.11)$$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_0^a \psi_v(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_v(x) dx = 9.86963 \hbar^2. \quad (2.3.12)$$

Ahora, utilizando las definiciones de las incertidumbres se tiene que:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = 0.180762, \quad (2.3.13)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \pi \hbar. \quad (2.3.14)$$

Si se utilizan la función de onda de la ecuación (2.3.1), la constante de normalización de la ecuación (2.3.3), la caja de longitud  $a = 1$  y el parámetro variacional a  $b = 0.95$ .

### 2.3.2. Método simple por incertidumbre

Para este sistema el método simple por incertidumbre no funciona debido a la ausencia de potencial, pues es éste el que genera soluciones no triviales en la ecuación (1.4.7). Para hacer una estimación del orden de magnitud de la energía, se va a partir del principio de incertidumbre y a considerar el orden de magnitud de la incertidumbre, una elección simple es  $\Delta x = \frac{a}{2}$ , lo que conduce a que la incertidumbre del momento lineal sea:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \implies \Delta p = \frac{\hbar}{2 \Delta x} = \frac{\hbar}{a}. \quad (2.3.15)$$

Se sabe que el potencial dentro de la caja es cero y el hamiltoniano es:

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.3.16)$$

por lo que se puede estimar que la energía mediante:

$$E_v = \frac{\Delta p^2}{2m} \quad (2.3.17)$$

Sustituyendo la ecuación (2.3.15) se obtiene:

$$\boxed{E_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2}}. \quad (2.3.18)$$

Ahora, calculando el error obtenido por el metodo variacional simple por incertidumbre del sistema:

$$\epsilon = \left( \frac{E_0 - E_v}{E_0} \right) 100 \% = 89.86788 \%. \quad (2.3.19)$$

Como se puede apreciar, el error es grande, pero ha permitido estimar de forma razonable el orden de magnitud de la energía.

## 2.4. Átomo de hidrógeno

El átomo de Hidrógeno es fundamental en el estudio de la mecánica cuántica, gracias a que es el átomo más simple y es el único resoluble de forma exacta.

### 2.4.1. Método tradicional

El estudio de este sistema es muy importante, pues permite llevar lo anteriormente realizado a tres dimensiones. Realizar esto generaría cierta complejidad, pero al tratarse de un sistema isotrópico, se sabe que sus propiedades no varían con el ángulo, por lo que al final únicamente depende de la distancia  $r$ , lo que conduce a que la función de onda variacional sea simplemente:

$$\psi_v(r) = Ae^{-br^2}. \quad (2.4.1)$$

Al ser un sistema tridimensional, se deben considerar las aportaciones del momento angular en cada dirección. Para ello, se utiliza el laplaciano y el cual, para este sistema, se debe encontrar en coordenadas esféricas. El laplaciano en coordenadas esféricas es el siguiente:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (2.4.2)$$

Debido a que la función de onda variacional no cuenta con términos ni de  $\theta$  ni de  $\phi$ , se obtiene que el laplaciano del sistema es:

$$\nabla^2 \psi_v = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_v. \quad (2.4.3)$$

Ya que se entiende un poco más el sistema, se procede a normalizar la función de onda variacional, obteniendo que la constante de normalización es la siguiente:

$$A = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_v^2(r) r^2 \sin(\theta) d\phi d\theta dr = \sqrt[4]{\frac{8^3 b^3}{\pi^3}}. \quad (2.4.4)$$

Ahora, se calcula el valor esperado de la energía cinética usando el laplaciano para coordenadas esféricas, lo que conduce a lo siguiente:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\psi_v^*(r)}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} (\psi_v(r)) \right) r^2 \sin(\theta) d\phi d\theta dr = \frac{3b\hbar^2}{2m}. \quad (2.4.5)$$

Se procede a obtener el valor esperado de la energía potencial, el cual es:

$$\langle V \rangle = -\alpha \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\psi_v^*(r) \psi_v(r)}{r} r^2 \sin(\theta) d\phi d\theta dr = -2\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}. \quad (2.4.6)$$

Con estos resultados, se tiene que el valor esperado de la energía del sistema en términos del parámetro variacional es el siguiente:

$$\langle E \rangle = \frac{3b\hbar^2}{2m} - 2\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}. \quad (2.4.7)$$

Se procede a minimizar el valor esperado de la energía:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle E \rangle}{db} &= 0, \\ \frac{3\hbar^2}{2m} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi b}} &= 0, \\ \therefore b &= \frac{8m^2 \alpha^2}{9\pi \hbar^4}, \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

por lo que el valor esperado para la energía es:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{3 \left( \frac{8m^2 \alpha^2}{9\pi \hbar^4} \right) \hbar^2}{2m} - 2\alpha \sqrt{\frac{2 \left( \frac{8m^2 \alpha^2}{9\pi \hbar^4} \right)}{\pi}}, \\ \langle E \rangle &= -\frac{4m\alpha^2}{3\pi \hbar^2}. \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Se procede a convertir esta energía de Joules a electronvoltios. Al hacer la conversión se obtiene que el valor esperado de la energía mínima es:

$$\langle E \rangle = -11.5488eV. \quad (2.4.10)$$

Gracias a este resultado, se puede bosquejar el hamiltoniano del sistema, el cual se presenta en la Figura 2.5. Además, se puede presentar el valor mínimo obtenido y el valor de la energía del estado base, el cual es de  $-13.6057eV$ .

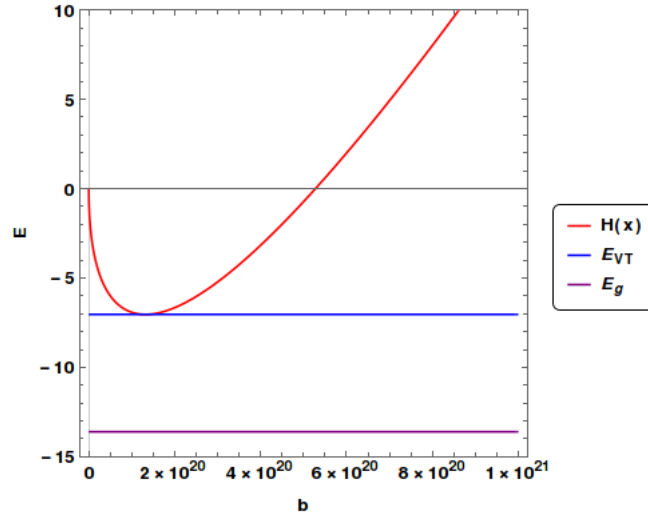


Figura 2.5: Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno, donde se pueden observar tanto el mínimo de la energía obtenido por el método variacional como la energía del estado base de dicho átomo.

Se puede observar tanto por el resultado obtenido de la ecuación (2.4.10) como por el gráfico de la Figura 2.5 que la energía variacional no se encuentra muy alejada del valor experimental de la energía del átomo de hidrógeno, por lo que ahora, se procede a calcular el error porcentual que ha generado el método variacional.

$$\epsilon = \left( \frac{E_0 - E_v}{E_0} \right) 100 \% = 15.1179 \%. \quad (2.4.11)$$

### 2.4.2. Método simple por incertidumbre

Se tiene que el hamiltoniano para este sistema es:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}, \quad (2.4.12)$$

, donde se tiene que:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Ahora, aplicando el principio de incertidumbre (1.4.1) se tiene que el hamiltoniano es:

$$H = \frac{\kappa^2 \hbar^2}{8mr^2} - \frac{\alpha}{r}. \quad (2.4.13)$$

Se procede a minimizar el hamiltoniano:

$$\frac{dH}{dx} = 0 = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{4mr^3} + \frac{\alpha}{r^2}. \quad (2.4.14)$$

Ahora, despejando esta última ecuación se encuentra el valor de  $r$  que minimiza la energía, el cual es:

$$r = \frac{\kappa^2 \hbar^2}{4m\alpha} \implies \frac{1}{r} = \frac{4m\alpha}{\kappa^2 \hbar^2}. \quad (2.4.15)$$

Sustituyendo este resultado en el hamiltoniano de la ecuación (2.4.13) se obtiene que el valor de la energía es:

$$\begin{aligned} E_v &= \frac{\kappa^2 \hbar^2}{8m} \left( \frac{16m^2 \alpha^2}{\kappa^4 \hbar^4} \right) - \alpha \left( \frac{4m\alpha}{\kappa^2 \hbar^2} \right), \\ &= \frac{2m\alpha^2}{\kappa^2 \hbar^2} - \frac{4m\alpha^2}{\kappa^2 \hbar^2}, \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

$$E_v = -\frac{2m\alpha^2}{\kappa^2 \hbar^2}.$$

Ahora, introduciendo el valor de  $\kappa = 1$  en los resultados anteriores se obtiene:

$$r = \frac{\hbar^2}{4m\alpha} = 1.32293 \times 10^{-11}, \quad (2.4.17)$$

$$E_v = -54.4226 eV. \quad (2.4.18)$$

Si se utiliza el principio de incertidumbre, se puede calcular el valor del momento, el cual tiene un valor de:

$$\Delta r \Delta p = \frac{\hbar}{2} \implies \Delta p = \frac{\hbar}{2r} \quad \therefore \quad \Delta p = \frac{2m\alpha}{\hbar}. \quad (2.4.19)$$

Con el valor de la energía variacional y el valor experimental ( $-13.6057 eV$ ), se puede calcular el error proporcionado por el método variacional. El valor del error es el siguiente:

$$\epsilon = \left( \frac{E_0 - E_v}{E_0} \right) 100\% = 299.9985\%, \quad (2.4.20)$$

por lo que el hamiltoniano de nuestro sistema con  $\kappa = 1$  es el siguiente:

$$H = \frac{\hbar^2}{8mr^2} - \frac{\alpha}{r}. \quad (2.4.21)$$



Graficando el hamiltoniano anterior se obtiene:

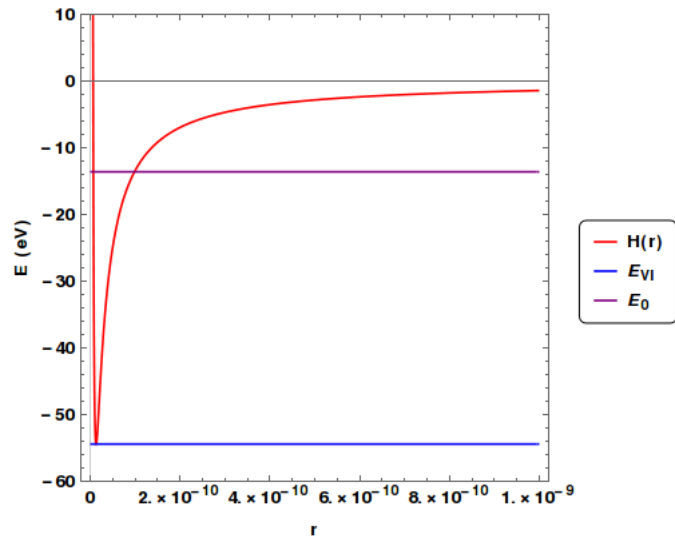


Figura 2.6: Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno con  $\kappa = 1$ .



---

# SUSY-QM

La supersimetría tiene el potencial de ser una herramienta matemática con grandes implicaciones en la física, ya que podría expandir el modelo estándar, presentar la unificación de las fuerzas fundamentales de la naturaleza y además nos permitiría mejorar la comprensión del mundo primigenio [5, 27]. Existe la hipótesis de que nuestro universo se formó al romperse la simetría de las interacciones fermiónicas.

Por otra parte, en la mecánica cuántica los sistemas de muchas partículas son irresolubles (en forma exacta) y solo pocos sistemas son factibles de resolver analíticamente. Es por esta razón que se fueron construyendo diferentes herramientas que permitieran resolverlos. Una de éstas herramientas es la *mecánica cuántica supersimétrica* (SUSY-QM). La SUSY-QM combina propiedades y reglas de la supersimetría con las de la mecánica cuántica. Utilizando esta herramienta, se puede reducir el problema de la solución de la ecuación de Schrödinger a un problema más simple que es de tipo algebraico.

## 3.1. Camino a la SUSY-QM

Se sabe que el comportamiento físico de una partícula viene caracterizado por la naturaleza de la interacción con un potencial  $V(x)$  [12], y que la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios es:

$$H\psi_n = E_n\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V(x)\psi_n. \quad (3.1.1)$$

Se puede apreciar que  $E_n$  es un valor arrojado por el operador hamiltoniano al aplicarse a  $\psi_n$ . Se denota el valor más bajo de la energía que se puede obtener como  $E_0$ , el cual procede de aplicar el hamiltoniano al estado  $\psi_0$ . La ecuación para el estado base es la siguiente:

$$H\psi_0 - E_0\psi_0 = 0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + (V(x) - E_0)\psi_0. \quad (3.1.2)$$

Para simplificar la expresión anterior, se usa la siguiente notación:

$$H_1 \equiv H - E_0, \quad (3.1.3)$$

$$V_1(x) \equiv V(x) - E_0. \quad (3.1.4)$$

De esta manera, se obtiene la siguiente expresión para la ecuación de Schrödinger y el hamiltoniano  $H_1$ :

$$H_1\psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V_1(x)\psi_0 = 0. \quad (3.1.5)$$

Si se centra la atención en el segundo y tercer miembros de la ecuación (3.1.5), se observa que se puede despejar el potencial y caracterizarlo con la función de onda del estado base de la siguiente manera:

$$V_1(x)\psi_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} \implies V_1(x) = \frac{\hbar^2\psi_0''}{2m\psi_0}. \quad (3.1.6)$$

Lo anterior es importante porque en el caso de que no se conozca como interactúa una partícula con el potencial, pero si la función de onda del estado base que lo describe, se puede usar la expresión anterior para encontrar el potencial correspondiente.

La ecuación (3.1.5) también puede escribirse de la siguiente manera:

$$H_1\psi_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_0 + V_1(x)\psi_0 = 0. \quad (3.1.7)$$

Se va a usar  $\hat{V}_1 \equiv V_1$ . Se tiene la siguiente factorización del hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \hat{V}_1(x) = \hat{f}^2(x) \implies H_1 &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{f}^2(x), \\ \therefore H_1 &= \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\hat{f}(x) \right] \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\hat{f}(x) \right], \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

donde  $f(x)$  es una función real. Ésta forma de factorización se conoce como *Método de Green* [6]. La  $f(x)$  se conoce como *superpotencial* y generalmente es representada como  $\hat{W}(x)$ , notación que se utilizará de ahora en adelante. Si se expande el hamiltoniano anterior se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1\psi &= \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\hat{W}(x) \right] \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\hat{W}(x) \right] \psi, \\ &= \frac{\hat{p}^2\psi}{2m} - \frac{i\hat{p}\hat{W}\psi}{\sqrt{2m}} + \frac{i\hat{W}\hat{p}\psi}{\sqrt{2m}} + \hat{W}^2\psi, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx}(W\psi) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W \frac{d}{dx}(\psi) + W^2\psi, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi \frac{d}{dx}(W) + W^2\psi, \\ \therefore \hat{H}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW}{dx} + W^2. \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

Comparando este resultado con la ecuación (3.1.7), se obtiene que el potencial  $V_1(x)$  en función del superpotencial es:

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx}. \quad (3.1.10)$$

Ahora, se procede a utilizar la factorización de Green para reescribir el hamiltoniano  $H_1$  como un producto de operadores, de tal forma que:

$$\hat{A} \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\hat{W}(x) \quad \text{y} \quad \hat{A}^\dagger \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\hat{W}(x) \implies \hat{H}_1 = \hat{A}^\dagger \hat{A}, \quad (3.1.11)$$

donde  $\hat{A}$  y  $\hat{A}^\dagger$  son operadores que dependen únicamente del superpotencial.

Se define  $H_2$  como el conjugado hermitico de  $H_1$ ,

$$\hat{H}_2 \equiv \hat{H}_1^\dagger = \hat{A} \hat{A}^\dagger. \quad (3.1.12)$$

El operador  $\hat{H}_2$  es conocido como el hamiltoniano compañero o hamiltoniano supersimétrico de  $H_1$ . Expandiendo los términos se tiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 \psi &= \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\hat{W}(x) \right] \left[ \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\hat{W}(x) \right] \psi, \\ &= \frac{\hat{p}^2 \psi}{2m} + \frac{i\hat{p}\hat{W}\psi}{\sqrt{2m}} - \frac{i\hat{W}\hat{p}\psi}{\sqrt{2m}} + \hat{W}^2 \psi, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} (W\psi) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W \frac{d}{dx} (\psi) + W^2 \psi, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi \frac{d}{dx} (W) + W^2 \psi, \\ \therefore \hat{H}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW}{dx} + W^2. \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

Se observa que la parte que correspondería al potencial  $V_1(x)$  ha cambiado, razón por la cual este será el potencial compañero y se representará con  $V_2(x)$ .

$$V_2(x) \equiv W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx}. \quad (3.1.14)$$

Esto permite observar lo siguiente.

- 1 Todo sistema cuántico factorizable puede representarse en forma supersimétrica.
- 2 El comportamiento del sistema queda definido exclusivamente por el superpotencial. Adicionalmente, el superpotencial se puede obtener a partir del conocimiento del estado base.
- 3 El hamiltoniano  $H_1$  que describe a la partícula tiene un compañero supersimétrico ( $H_2$ ), el cual es su complejo conjugado.

Cabe mencionar, que existe otra expresión equivalente para el superpotencial es la siguiente:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}. \quad (3.1.15)$$

Si se introduce ésta última expresión en la ecuación (3.1.10) y se usa la relación existente en la ecuación (3.1.6) entre la función de onda del estado base y el potencial  $V_1$ , se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{2m}{\hbar^2} \left( W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \right) = \frac{2m}{\hbar^2} W^2(x) - \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} W'(x). \quad (3.1.16)$$

Ahora, interesa encontrar una relación entre los potenciales  $V_1$  y  $V_2$ . Para ello, se va a usar la ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano compañero aplicado al estado base, lo cual se expresa de la siguiente manera:

$$\hat{H}_2 \psi_0 = E_0^{(2)} \psi_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi_0 + \hat{V}_2(x) \psi_0, \quad (3.1.17)$$

donde  $E_0^{(2)}$  es la energía del estado base del hamiltoniano compañero.

Si se reordenan los términos de la ecuación anterior y se divide todo entre  $\psi_0$  se obtiene:

$$\frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{2m(V_2(x) - E_0^{(2)})}{\hbar^2}. \quad (3.1.18)$$

Usando la expresión anterior y la ecuación (3.1.6), se obtiene lo siguiente:

$$\frac{2mV_1(x)}{\hbar^2} = \frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{2m(V_2(x) - E_0^{(2)})}{\hbar^2} \implies V_1(x) = V_2(x) - E_0^{(2)}. \quad (3.1.19)$$

De la ecuación anterior se destaca que el potencial compañero  $V_2$  es igual al potencial  $V_1$ , sólo que desplazado una constante con valor  $E_0^{(2)}$ .

Como último, se va a establecer una relación entre la energía del estado base del hamiltoniano compañero y el superpotencial, para ello se usan las definiciones tanto de  $V_1$  como  $V_2$ .

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= V_2(x) - V_1(x), \\ &= W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} - \left[ W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} \right], \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

$$\therefore \frac{E_0^{(2)}}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx}.$$

La expresión anterior es de vital importancia, porque muestra que la derivada del superpotencial es equivalente a una constante. Además, en caso de conocer la energía del

estado base del hamiltoniano compañero, se puede encontrar el superpotencial al resolver la ecuación diferencial.

Es fácil observar que la relación entre los potenciales supersimétricos  $V_1(x)$  y  $V_2(x)$  permite encontrar una relación entre los hamiltonianos. Dicha relación es la siguiente:

$$H_2 = H_1 + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} = H_1 + E_0^{(2)}. \quad (3.1.21)$$

La ecuación anterior tiene una gran implicación, la cual es que el espectro energético del hamiltoniano compañero es el mismo que el del hamiltoniano original desplazado una constante  $E_0^{(2)}$ . También permite observar que únicamente se tiene que resolver el hamiltoniano original y agregar el valor del cambio del superpotencial para encontrar el comportamiento del hamiltoniano compañero.

## 3.2. Jerarquía de hamiltonianos

La factorización del hamiltoniano es una de técnica que emplea la SUSY-QM. Fue introducida por Dirac y se sigue empleando hasta la fecha. Tiene muchas consecuencias en la QM [8]. Una de las aportaciones que ha traído ésta técnica es que se pueden tratar los problemas de eigenvalores de forma directa [19]. Otra contribución que se obtiene es poder crear una relación entre los hamiltonianos y energías bosónicas y fermiónicas, con la finalidad de poder construir un sistema de varios hamiltonianos que se encuentren ligados por el espectro de energía, lo que es conocido como Jerarquía o Cadena de hamiltonianos[23].

La *Jerarquía de hamiltonianos* es un procedimiento por el cual, partiendo de un hamiltoniano, se puede generar un nuevo hamiltoniano, el cual permita conocer los siguientes niveles energéticos o las funciones de onda que nos den acceso a estos niveles energéticos subsecuentes.

### 3.2.1. Teoría

Como ya se ha mencionado previamente, el hamiltoniano descrito por la ecuación (3.1.7) representa un hamiltoniano cuya energía mínima fue fijada en cero, y el hamiltoniano de la ecuación (3.1.13) representa el hamiltoniano compañero de  $H_1$ , cuyo espectro energético es igual al de  $H_1$  simplemente que desplazado una constante  $E_0^{(2)}$ , por lo que existe una correlación entre ambos hamiltonianos por medio del espectro energético. A esta correlación se le conoce como jerarquía de hamiltonianos y es fácilmente apreciable por medio de los operadores escalera, los cuales son los operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{A}^\dagger$  de la ecuación (3.1.11).

Si se aplica el procedimiento de los operadores escalera utilizado en la mecánica cuántica, se tiene que al operar  $A\psi_0 = 0 \implies H_1\psi_0 = A^\dagger A\psi_0 = 0$ . Recuérdese que el hamiltoniano compañero se define según la ecuación (3.1.13) como  $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ . Lo relevante aquí es que se puede ver que tanto los eigenvalores de la energía y las funciones de onda de  $H_1$  y  $H_2$  están relacionadas. Para trabajar y demostrar las relaciones se va a usar la siguiente notación:  $\psi_n^{(m)}$  es el estado  $n$ -ésimo del  $m$ -ésimo sistema cuántico y  $E_n^{(m)}$  es la energía  $n$ -ésima del  $m$ -ésimo sistema.

Las relaciones entre los hamiltonianos  $H_1$  y  $H_2$  son:

- Para  $n > 0$  tenemos que  $H_1$ :

$$H_1 \psi_n^{(1)} = A^\dagger A \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \implies H_2 \left( A \psi_n^{(1)} \right) = A A^\dagger A \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \left( A \psi_n^{(1)} \right). \quad (3.2.1)$$

- Similarmente para  $H_2$ :

$$H_2 \psi_n^{(2)} = A A^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)} \implies H_1 \left( A^\dagger \psi_n^{(2)} \right) = A^\dagger A A^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \left( A^\dagger \psi_n^{(2)} \right). \quad (3.2.2)$$

Gracias a las relaciones anteriores y a que  $E_0^{(1)} = 0$  se tiene que los eigenvalores y eigenfunciones de  $H_1$  y  $H_2$  (para  $n = 0, 1, 2, \dots$ ) están relacionadas por las siguientes ecuaciones:

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)} \quad , \quad E_0^{(1)} = 0, \quad (3.2.3)$$

$$\psi_n^{(2)} = \left( E_{n+1}^{(1)} \right)^{-1/2} A \psi_{n+1}^{(1)}, \quad (3.2.4)$$

$$\psi_{n+1}^{(1)} = \left( E_n^{(2)} \right)^{-1/2} A^\dagger \psi_n^{(2)}. \quad (3.2.5)$$

Algo que se puede notar es que si se utiliza la propiedad que presenta la ecuación (3.1.16) en el hamiltoniano compañero (ecuación (3.1.12)), se puede ver que su energía del estado base es:

$$\boxed{E_0^{(2)} = E_1^{(1)} = \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x)}, \quad (3.2.6)$$

lo que permite ver que también existe una relación entre la energía mínima del segundo sistema, la energía del estado excitado del primer sistema y el superpotencial.

La parte esencial de la jerarquía de hamiltonianos viene del hecho de que como los espectros de energía de los hamiltonianos compañeros son el mismo, se puede a partir de éstos generar los subsecuentes niveles energéticos y a su vez, una cadena de hamiltonianos, todos partiendo del primero. Para que se pueda generar esta jerarquía, el primer hamiltoniano debe de tener una energía de estado base con valor cero. Esto para que el hamiltoniano sea factorizable y todas las relaciones previas sean útiles.

Para poder crear una notación concisa, se definen los siguientes operadores escalera:

$$\hat{A}_1 \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} - i\hat{W}_1(x) \quad \text{y} \quad \hat{A}_1^\dagger \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + i\hat{W}_1(x), \quad (3.2.7)$$

donde  $\hat{W}_1(x)$  es una función real y es el superpotencial que se encarga de mediar la relación entre el hamiltoniano  $H_1$  y su compañero supersimétrico  $H_2$ .

Debido a que la energía  $E_0^{(1)} = 0$ , se puede adicionar a nuestro hamiltoniano  $H_1$  y no afectaría a los cálculos ni a la física del problema, como se muestra a continuación.

$$H_1 = A_1^\dagger A_1 + E_0^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x). \quad (3.2.8)$$



Debido a esto, ahora el potencial queda reescrito en términos de los superpotenciales de la siguiente manera:

$$V_1(x) = W_1^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (3.2.9)$$

Gracias a la consideración de mandar a cero la energía del estado fundamental del sistema, ahora se pueden usar las relaciones establecidas en las ecuaciones (3.2.3), (3.2.4) y (3.2.5), y de esta manera construir hamiltonianos compañeros que estén enlazados por los niveles energéticos y las funciones de onda. Por lo tanto, haciendo uso de las ecuaciones anteriormente mencionadas se genera que el  $H_2$  es:

$$H_2 = A_1 A_1^\dagger + E_0^{(1)}. \quad (3.2.10)$$

Por esto, se puede reescribir el potencial compañero de  $V_1$ , el cual se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} V_2(x) &= W_1^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_1'(x) + E_0^{(1)}, \\ &= V_1(x) + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}}W_1'(x), \\ &= V_1(x) - \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d^2}{dx^2} \ln(\psi_0). \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

Debido a la expresión anterior, se tienen tres formas distintas de construir el potencial compañero. Claro que dependerá de los elementos con los que se cuenten y de la complejidad de estos, que se seleccione alguna de las diversas formas de construirlo.

Volviendo a las relaciones entre Hamiltonianos, se obtiene que:

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \quad (3.2.12)$$

$$\psi_n^{(2)} = \left(E_{n+1}^{(1)} - E_0^{(1)}\right)^{-1/2} A_1 \psi_{n+1}^{(1)}. \quad (3.2.13)$$

Como se puede ver, el estado base de  $H_2$  es el primer estado excitado de  $H_1$ , por lo que se puede factorizar de forma similar a como se hizo con  $H_1$  anteriormente, lo que lleva a:

$$H_2 = A_1 A_1^\dagger + E_0^{(1)} = A_2^\dagger A_2 + E_0^{(2)} = A_2^\dagger A_2 + E_1^{(1)}. \quad (3.2.14)$$

Esto conduce claramente a que:

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} - iW_2(x), \\ A_2^\dagger &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + iW_2(x), \\ W_2(x) &= -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \ln(\psi_0^{(2)}), \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

donde  $A_2$  y  $A_2^\dagger$  son los operadores escalera que definen el estado base de  $H_2$  como el mínimo asequible, y  $W_2(x)$  es el superpotencial que enlaza al segundo sistema con un tercero. Este tercer sistema es el equivalente al segundo pero desplazado una constante. La definición de tercer hamiltoniano es la siguiente:

$$H_3 = A_2 A_2^\dagger + E_1^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_3(x). \quad (3.2.16)$$

Entonces, el potencial es:

$$\begin{aligned} V_3(x) &= W_2^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_2'(x) + E_1^{(1)}, \\ &= V_2(x) + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} - \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d^2}{dx^2} \ln(\psi_0^{(2)}), \\ &= V_1(x) + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} - \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d^2}{dx^2} \ln(\psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)}). \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

Como se puede ver, ahora es posible escribir el tercer potencial en función del primero y de las funciones de los estados bases de los hamiltoniano anteriores, lo que permite ver que la función de onda del tercer hamiltoniano y los niveles de energía también estarán relacionados con los de los hamiltonianos anteriores, y esto se ve de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} E_n^{(3)} &= E_{n+1}^{(2)} = E_{n+2}^{(1)}, \\ \psi_n^{(3)} &= \left(E_{n+1}^{(2)} - E_0^{(2)}\right)^{-1/2} A_2 \psi_{n+1}^{(2)}, \\ &= \left(E_{n+2}^{(1)} - E_1^{(1)}\right)^{-1/2} \left(E_{n+2}^{(1)} - E_0^{(1)}\right)^{-1/2} A_2 A_1 \psi_{n+2}^{(1)}. \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

Al observar esto, se ve que se puede repetir múltiples veces el mismo procedimiento, y de esta forma, crear una generalización que vaya hasta el  $p$ -ésimo hamiltoniano (el cual es el límite energético máximo, al tener como relación  $A_p^\dagger \psi_p = 0$ ). La expresión del hamiltoniano generalizado es la siguiente:

$$H_m = A_m^\dagger A_m + E_{m-1}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_m(x), \quad \text{para } m = 2, 3, \dots, p, \quad (3.2.19)$$

donde:

$$\begin{aligned} A_m &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} - iW_m(x), \\ A_m^\dagger &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + iW_m(x), \\ W_m(x) &= -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \ln(\psi_0^{(m)}), \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

y claramente:

$$\begin{aligned}
E_n^{(m)} &= E_{n+1}^{(m-1)} = \dots = E_{n+m-1}^{(1)}, \\
\psi_n^m &= \left(E_{n+m-1}^{(1)} - E_{m-2}^{(1)}\right)^{-1/2} \dots \left(E_{n+m-1}^{(1)} - E_0^{(1)}\right)^{-1/2} A_{m-1} \dots A_1 \psi_{n+m-1}^{(1)}, \quad (3.2.21) \\
V_m(x) &= V_1(x) - \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\psi_0^{(1)} \dots \psi_0^{(m-1)}\right).
\end{aligned}$$

De éstos últimos resultados se puede apreciar que tanto las energías, las funciones de onda y los potenciales del  $m$ -ésimo sistema se encuentran ligados a los valores de los sistemas anteriores. Además, se pueden conocer todos los niveles energéticos de  $H_1$  calculando las energías base de cada hamiltoniano supersimétrico perteneciente a la jerarquía.

### 3.3. Método variacional aplicado a la SUSY-QM

Ya que se conoce tanto la maquinaria matemática de la supersimetría como sus implicaciones, ahora es preciso mostrar como se aplica el método variacional a la SUSY-QM.

Al igual que con la QM, se va a trabajar tanto el método tradicional como el simple por incertidumbre para la SUSY-QM.

#### 3.3.1. Método variacional tradicional

Para trabajar la SUSY-QM por el método variacional tradicional, se va a partir de las ecuaciones (1.3.17) y (1.3.18), las cuales establecen cómo deben de ser las funciones de onda (con condiciones y sin condiciones a la frontera respectivamente) óptimas para usar como aproximación.

Cuando no existen condiciones a la frontera, se sabe que la función de onda que se utiliza será la siguiente

$$\psi_v(x, b) = A(b)e^{-bx^2}, \quad A(b) = \sqrt[4]{\frac{2b}{\pi}}, \quad (3.3.1)$$

donde  $b$  nuevamente es el parámetro variacional y  $A$  es la amplitud normalizada de la función gaussiana.

Se procede a calcular los valores esperados de las energías cinética y potencial [13], de la misma manera que se ha realizado para la QM y usando la relación entre hamiltonianos obtenida en la ecuación (3.1.21), se tiene lo siguiente para estimar los valores esperados de ambos hamiltonianos:

$$\begin{aligned}
\langle H_1 \rangle &= \langle T \rangle + \langle V_1 \rangle = \langle T \rangle + \langle W_1^2 \rangle - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \langle W_1'(x) \rangle + E_0^{(1)}, \\
\langle H_2 \rangle &= \langle H_1 \rangle + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \langle W_1'(x) \rangle + E_0^{(1)}.
\end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Ya con todo esto, se procede a calcular el valor del parámetro variacional que minimiza el valor esperado de la energía para cada hamiltoniano, de tal manera que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle H_1 \rangle}{\partial b} &= 0, \\ \frac{\partial \langle H_2 \rangle}{\partial b} &= \frac{\partial \langle H_1 \rangle}{\partial b} + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\partial \langle W'_1(x) \rangle}{\partial b} = 0.\end{aligned}\tag{3.3.3}$$

Estos resultados conducen a que el parámetro variacional  $b$  que minimiza el valor esperado de la energía es el mismo para  $H_1$ ,  $H_2$  y todos los hamiltonianos que se encuentren en la jerarquía.

Para encontrar el valor esperado mínimo de la energía, únicamente se debe introducir el valor del parámetro variacional que minimiza la energía en la ecuación (3.3.2).

### 3.3.2. Método variacional simple por incertidumbre

Una ventaja con la que cuenta este método es que se puede trabajar directamente desde la jerarquía de hamiltonianos, lo que permite saber desde el inicio que la energía base del hamiltoniano  $H_1$  es cero y la energía del estado base del hamiltoniano compañero cumple con la ecuación (3.2.6), por lo que es muy importante conocer la forma del superpotencial.

Si se trabajan los hamiltonianos con el principio de incertidumbre se obtiene:

$$H_{1,2} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{8mx^2} + W^2(x) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x).\tag{3.3.4}$$

Minimizando los hamiltonianos se tiene:

$$\frac{dH_{1,2}}{dx} = 0 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{4mx^3} + 2W(x)W'(x) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W''(x).\tag{3.3.5}$$

Esta última ecuación se puede simplificar más si se utiliza la ecuación (3.2.6), pues dado que  $W'(x)$  es una constante; entonces al minimizar los hamiltonianos se tiene:

$$-\frac{\hbar^2 \kappa^2}{4mx^3} + 2W(x)W'(x) = 0.\tag{3.3.6}$$

Una vez que se conozca el superpotencial del sistema cuántico, simplemente se procede a derivar y despejar. De ésta forma, se va a encontrar el valor de  $x$  que minimiza la energía para ambos hamiltonianos. Sea  $x_0$  el valor de  $x$  que minimiza la energía.

$$E_0^{(1)} = 0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{8mx_0^2} + W^2(x_0) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x_0),\tag{3.3.7}$$

$$E_0^{(2)} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{8mx_0^2} + W^2(x_0) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x_0).\tag{3.3.8}$$

Si se presta atención, al sustituir el valor de  $x$  que minimiza la energía en el primer hamiltoniano, se puede ver que existe un único valor del modulador de incertidumbre ( $\kappa$ ), que cumple con la ecuación (3.2.3), de tal forma que se tendrá:

$$\kappa = \frac{2x_0}{\hbar} \sqrt{2m \left( \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x_0) - W^2(x_0) \right)} \geq 1. \quad (3.3.9)$$

Se puede ver que para la ecuación (3.3.9) existe un único valor del modulador que cumple con la restricción  $\kappa \geq 1$  y que permite que la energía del estado base sea igual a cero. El hecho de que el modulador de incertidumbre  $\kappa$  tenga un valor definido para los sistemas supersimétricos indica que existe un único valor para el modulador que minimiza la energía igualmente en la QM.



## Ejemplos en SUSY-QM

### 4.1. Oscilador armónico

Como se sabe, el oscilador armónico es uno de los problemas fundamentales de la física, en especial para la QM. Por ésta razón, es lógico pensar que tiene también una gran relevancia para la SUSY-QM.

Para encontrar el superpotencial asociado a este problema se parte de la ecuación (3.1.10) y de la definición de  $V_1(x)$ , por lo que se tiene la siguiente ecuación diferencial,

$$W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} = V(x) - E_0. \quad (4.1.1)$$

Se sabe que el potencial del oscilador armónico es  $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ , por lo que nuestra ecuación diferencial de Riccati es la siguiente:

$$W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - E_0. \quad (4.1.2)$$

Al resolver la ecuación diferencial, se obtiene que:

$$W = \sqrt{\frac{m}{2}} \omega x \quad y \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (4.1.3)$$

por lo que se tiene que los dos primeros hamiltonianos son:

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (4.1.4)$$

$$H_2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (4.1.5)$$

Se puede apreciar que los primeros dos términos del hamiltoniano compañero son iguales a los del hamiltoniano del estado base, lo que permite reescribir el hamiltoniano compañero de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
H_2 &= H_1 + \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{2}, \\
H_2 &= H_1 + \hbar\omega.
\end{aligned}
\tag{4.1.6}$$

Con esto se puede escribir de forma general el comportamiento de los siguientes hamiltonianos, de tal forma que se tiene:

$$H_{n+1} = H_1 + n\hbar\omega, \tag{4.1.7}$$

por lo que únicamente se debe calcular la energía del estado base ( $H_1$ ) para poder conocer la de los siguientes.

#### 4.1.1. Método tradicional

Igualmente que en la QM, se va a utilizar la función gaussiana (3.3.1), lo que permite calcular los valores esperados tanto de la energía potencial como cinética. Se tiene que:

$$\begin{aligned}
\langle T_1 \rangle &= \langle \psi_v | T_1 | \psi_v \rangle, \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-bx^2} dx, \\
&= \frac{\hbar^2 b}{2m},
\end{aligned}
\tag{4.1.8}$$

$$\begin{aligned}
\langle V_1 \rangle &= \langle \psi_v | V_1 | \psi_v \rangle, \\
&= \frac{m\omega^2}{2} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left( x^2 - \frac{\hbar}{m\omega} \right) e^{-bx^2} dx, \\
&= \frac{m\omega^2}{8b} - \frac{\hbar\omega}{2},
\end{aligned}
\tag{4.1.9}$$

lo que conduce a que el valor esperado de la energía del estado base sea:

$$\langle E_0^{(1)} \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} - \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{4.1.10}$$

Ahora, se procede a minimizar el valor esperado de la energía con respecto al parámetro variacional.

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle E_0^{(1)} \rangle}{db} &= 0, \\
0 &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2}, \\
\boxed{b} &= \frac{m\omega}{2\hbar}.
\end{aligned}
\tag{4.1.11}$$

Si se introduce el valor del parámetro variacional que minimiza la energía en la ecuación (4.1.10), entonces se obtiene que el valor esperado de la energía es:



$$\langle E_0^{(1)} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right) + \frac{m\omega^2}{8} \left( \frac{2\hbar}{m\omega} \right) - \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (4.1.12)$$

$$\boxed{\langle E_0^{(1)} \rangle = 0,}$$

por lo que el el valor esperado de la energía del estado base del hamiltoniano compañero es:

$$\begin{aligned} \langle E_0^{(2)} \rangle &= \langle E_0^{(1)} \rangle + \hbar\omega, \\ \langle E_0^{(2)} \rangle &= 0 + \hbar\omega, \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

$$\boxed{\langle E_0^{(2)} \rangle = \hbar\omega,}$$

y para el  $n$ -ésimo estado se usa la relación de la jerarquía obtenida en la ecuación 4.1.7 :

$$\begin{aligned} \langle E_0^{(n)} \rangle &= \langle E_0^{(1)} \rangle + n\hbar\omega, \\ \langle E_0^{(n)} \rangle &= 0 + n\hbar\omega, \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

$$\boxed{\langle E_0^{(n)} \rangle = n\hbar\omega.}$$

#### 4.1.2. Método simple por incertidumbre

Se parte de la ecuación (4.1.4) y utilizando el principio de incertidumbre con el modulador, se obtiene:

$$H_1 = \frac{\hbar^2 \mathcal{K}^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (4.1.15)$$

Ahora, se procede a minimizar la función hamiltoniano con respecto a la posición y se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dH_1}{dx} &= 0, \\ \frac{\hbar^2 \mathcal{K}^2}{4mx^3} &= m\omega^2 x, \\ x^4 &= \frac{\hbar^2 \mathcal{K}^2}{4m^2 \omega^2}, \\ x^2 &= \frac{\hbar \mathcal{K}}{2m\omega}, \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

$$\boxed{x = \sqrt{\frac{\mathcal{K}\hbar}{2m\omega}}.}$$

Sustituyendo el valor que minimiza la energía del hamiltoniano, se tiene:

$$\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= \frac{\hbar^2 \kappa^2}{8m} \left( \frac{2m\omega}{\kappa \hbar} \right) + \frac{m\omega^2}{2} \left( \frac{\kappa \hbar}{2m\omega} \right) - \frac{\hbar\omega}{2}, \\
E_0^{(1)} &= \frac{\kappa \hbar \omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}, \\
\boxed{E_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega}{2} (\kappa - 1)}.
\end{aligned} \tag{4.1.17}$$

Ahora, se procede a determinar el valor de  $\kappa$  que minimiza la incertidumbre del sistema. Para ello se parte de la idea de que  $E_0^{(1)} = 0$ ,

$$\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= 0, \\
\frac{\hbar\omega}{2} (\kappa - 1) &= 0, \\
\boxed{\therefore \kappa = 1}.
\end{aligned} \tag{4.1.18}$$

Con el valor definido del modulador de incertidumbre, se sustituye el valor de  $\kappa$  en la ecuación (4.1.17) y se obtiene que las energías de los estados base para ambos hamiltonianos son:

$$\boxed{E_0^{(1)} = 0} \quad , \quad \boxed{E_0^{(2)} = \hbar\omega} \tag{4.1.19}$$

Se realiza una tabla para mostrar todos los datos obtenidos con el valor de  $\kappa = 1$ ,

$\kappa$	$x$	$p$	$\Delta x \Delta p$	$E_0^{(1)}$	$E_0^{(2)}$
1	$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$	$\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}}$	$\frac{\hbar}{2}$	0	$\hbar\omega$

Tabla 4.1: Valores obtenidos para las incertidumbres, el principio de incertidumbre y las energías de los estados base de los primeros dos estados utilizando  $\kappa = 1$ .

Como se logra apreciar en la tabla anterior, los valores de las energías concuerdan totalmente con los obtenidos por el método tradicional, además de que concuerdan con las energías que se obtienen de forma exacta.

Usando la ecuación (4.1.7) se puede encontrar la energía para el resto de hamiltonianos pertenecientes a la jerarquía.

$$E_0^{(n+1)} = n\hbar\omega. \tag{4.1.20}$$

## 4.2. Partícula en un campo magnético homogéneo

Como se ha visto previamente, el hamiltoniano del problema de la partícula en un campo magnético uniforme se puede expresar como la suma del hamiltoniano de una partícula libre y otro de un oscilador armónico bidimensional (2.2). Para trabajar este sistema, se propone que el superpotencial es un vector, el cual tiene la siguiente forma:

$$\vec{W} = \begin{pmatrix} A + Bx \\ C + Dy \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2.1)$$

El potencial supersimétrico  $V_1$  queda definido así:

$$V_1(x, y) = \vec{W} \cdot \vec{W} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \vec{\nabla} \cdot \vec{W}. \quad (4.2.2)$$

Introduciendo el potencial obtenido en el ejercicio homólogo de la QM (2.2.6) y considerando que el momento angular en el estado base es cero, se tiene que la ecuación para encontrar el valor de los parámetros  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$  es la siguiente:

$$\vec{W} \cdot \vec{W} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \vec{\nabla} \cdot \vec{W} = \frac{m\omega_c^2(x^2 + y^2)}{8} - E_0. \quad (4.2.3)$$

Si se resuelve la ecuación anterior, se puede ver que se obtienen los siguientes resultados:

$$A = C = 0 \quad , \quad B = D = \sqrt{\frac{m}{8}} \omega_c \quad y \quad E_0 = \frac{\hbar\omega_c}{2}, \quad (4.2.4)$$

por lo que los hamiltonianos supersimétricos son los siguientes:

$$H_1 = \frac{1}{2m} \left( p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + \frac{m^2\omega_c^2(x^2 + y^2)}{4} \right) - \frac{\hbar\omega_c}{2}, \quad (4.2.5)$$

$$H_2 = \frac{1}{2m} \left( p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + \frac{m^2\omega_c^2(x^2 + y^2)}{4} \right) + \frac{\hbar\omega_c}{2}. \quad (4.2.6)$$

Se puede apreciar que los primeros cuatro términos del hamiltoniano compañero son iguales a los del hamiltoniano del estado base, lo que permite reescribir el hamiltoniano compañero como:

$$\begin{aligned} H_2 &= H_1 + \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar\omega_c}{2}, \\ H_2 &= H_1 + \hbar\omega_c. \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Para el resto de hamiltonianos pertenecientes a la jerarquía, se encuentra la siguiente relación.

$$H_{n+1} = H_1 + n\hbar\omega_c. \quad (4.2.8)$$

### 4.2.1. Método tradicional

Se procede a calcular los valores esperados de la energía del hamiltoniano del estado base. Para esto, también se va a utilizar la función de onda que se utilizó para la Q.M.

$$\begin{aligned}
 \langle T \rangle &= \langle \psi_v | T | \psi_v \rangle, \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} dv, \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c), \\
 \langle V \rangle &= \langle \psi_v | V | \psi_v \rangle, \\
 &= \frac{m\omega_c^2}{8} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} (x^2 + y^2) e^{-(ax^2+by^2+cz^2)} dv, \\
 &= \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right),
 \end{aligned} \tag{4.2.9}$$

por lo que se obtiene que el valor esperado de la energía sea:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \langle T \rangle + \langle V \rangle - \frac{\hbar\omega}{2}, \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) - \frac{\hbar\omega}{2}.
 \end{aligned} \tag{4.2.10}$$

Ahora, se minimiza la energía con respecto a cada uno de los parámetros variacionales.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial a} = 0 &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega_c^2}{32a^2}, \\
 a^2 &= \frac{m^2\omega_c^2}{16\hbar^2}, \\
 \therefore a &= \frac{m\omega_c}{4\hbar},
 \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial b} = 0 &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega_c^2}{32b^2}, \\
 b^2 &= \frac{m^2\omega_c^2}{16\hbar^2}, \\
 \therefore b &= \frac{m\omega_c}{4\hbar} \implies \boxed{a = b.}
 \end{aligned} \tag{4.2.12}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial c} = 0 &= \frac{\hbar^2}{2m}, \\
 \therefore c &= \text{constante.}
 \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

Debido a que el movimiento en  $z$  no cuenta con un potencial, el movimiento en dicha dirección corresponde al de una partícula libre. Se sabe que el valor esperado de la energía

de una partícula libre en dirección  $z$  es  $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ . Con ésto y el valor esperado de la energía cinética en dirección  $z$ , el cual corresponde al término que contiene a  $c$  en el hamiltoniano (4.2.10), se puede conocer el valor de  $c$  por medio de la siguiente expresión.

$$\frac{\hbar^2 c}{2m} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \implies c = k_z^2. \quad (4.2.14)$$

Sustituyendo el resultado anterior y los valores esperados obtenidos en las ecuaciones (4.2.11) y (4.2.12) se obtiene que la energía mínima esperada es:

$$\begin{aligned} \langle E_0^{(1)} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} (a + b + c) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) - \frac{m\omega_c^2}{32a^2}, \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{m\omega_c}{2\hbar} + k_z^2 \right) + \frac{m\omega_c^2}{32} \left( \frac{8\hbar}{m\omega_c} \right) - \frac{m\omega_c^2}{32a^2}, \\ &= \frac{\hbar\omega_c}{4} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_c}{4} - \frac{m\omega_c^2}{32a^2} - \frac{m\omega_c^2}{32a^2}. \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

Sustituyendo el valor de  $a$  obtenido en la ecuación (4.2.11) resulta que el valor de la energía del estado base sea:

$$\langle E_0^{(1)} \rangle = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad (4.2.16)$$

por lo que el valor esperado para la energía del estado base del hamiltoniano compañero es:

$$\langle E_0^{(2)} \rangle = \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \quad (4.2.17)$$

Cabe mencionar que la energía es mínima cuando  $k_z = 0$ , lo que reduce nuestro resultado a un oscilador armónico bidimensional.

Utilizando la ecuación (4.2.8) se obtiene el valor esperado de la energía de los otros hamiltonianos que pertenecen a la jerarquía del sistema

$$\langle E_{n+1}^{(0)} \rangle = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + n\hbar\omega_c. \quad (4.2.18)$$

### 4.2.2. Método simple por incertidumbre

Se va a proceder a trabajar con el principio de incertidumbre. Sustituyendo  $p_i = \frac{\hbar k_i}{2x_i}$ , entonces se tiene que el hamiltoniano es:

$$H_1 = \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar^2 k_x^2}{4x^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{4y^2} + \hbar^2 k_z^2 + \frac{m^2 \omega_c^2 (x^2 + y^2)}{4} \right] - \frac{\hbar\omega_c}{2}. \quad (4.2.19)$$

Ahora, se procede a minimizar la energía con respecto a cada una de las posiciones.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_1}{\partial x} &= 0, \\
0 &= -\frac{\varkappa_x^2 \hbar^2}{4m x^3} + \frac{m\omega_c^2 x}{4}, \\
x^4 &= \frac{\varkappa_x^2 \hbar^2}{m^2 \omega_c^2}, \\
x^2 &= \frac{\varkappa_x \hbar}{m\omega_c}, \\
\boxed{x} &= \sqrt{\frac{\varkappa_x \hbar}{m\omega_c}},
\end{aligned} \tag{4.2.20}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_1}{\partial y} &= 0, \\
0 &= -\frac{\varkappa_y^2 \hbar^2}{4m y^3} + \frac{m\omega_c^2 y}{4}, \\
y^4 &= \frac{\varkappa_y^2 \hbar^2}{m^2 \omega_c^2}, \\
y^2 &= \frac{\varkappa_y \hbar}{m\omega_c}, \\
\boxed{y} &= \sqrt{\frac{\varkappa_y \hbar}{m\omega_c}},
\end{aligned} \tag{4.2.21}$$

Se introducen estos valores que minimizan la energía en el hamiltoniano y se obtiene:

$$\begin{aligned}
H_1 &= \frac{1}{2m} \left[ \frac{\varkappa_x \hbar m \omega_c}{4} + \frac{\varkappa_y \hbar m \omega_c}{4} + \hbar^2 k_z^2 + \frac{m\omega_c \hbar (\varkappa_x + \varkappa_y)}{4} \right] - \frac{\hbar\omega_c}{2}, \\
H_1 &= \frac{1}{2m} \left[ \hbar^2 k_z^2 + \frac{m\omega_c \hbar (\varkappa_x + \varkappa_y)}{2} \right] - \frac{\hbar\omega_c}{2}, \\
H_1 &= \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_c}{4} [\varkappa_x + \varkappa_y - 2].
\end{aligned} \tag{4.2.22}$$

Para hacer que la energía del estado base sea igual a cero, entonces  $k_z = 0$ , pero ahora se tiene que solucionar la parte de  $\varkappa_x + \varkappa_y - 2$ . Una forma de solucionar esto es distribuyendo las partes, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\varkappa_x + \varkappa_y - 2 &= 0, \\
(\varkappa_x - 1) + (\varkappa_y - 1) &= 0, \\
\therefore \boxed{\varkappa_x = \varkappa_y = 1}.
\end{aligned} \tag{4.2.23}$$

Éste último resultado que se ha obtenido proyecta que existe una clara simetría en el sistema; porque si  $\varkappa_x = \varkappa_y \implies x = y$ . Se sabe que éste resultado es el único valido

porque ambos moduladores deben de cumplir con ser mayor o igual a uno, para que el principio de incertidumbre se cumpla.

Ahora se puede saber que la energía del estado base del hamiltoniano compañero es:

$$E_0^{(2)} = \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \quad (4.2.24)$$

Estos resultados muestran que si no hay movimiento vertical, se obtiene exactamente la energía de un oscilador armónico bidimensional.

Utilizando la ecuación (4.2.8) se puede encontrar que la energía para el resto de hamiltonianos de la jerarquía es:

$$E_{n+1}^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + n\hbar\omega_c. \quad (4.2.25)$$

### 4.3. Partícula en la caja

Como sabemos, la partícula en la caja es un problema fundamental en la mecánica cuántica porque permite conocer el comportamiento bajo pozos de potencial. Por eso es importante trasladar este problema al caso supersimétrico.

Al igual que en el oscilador armónico, se parte de la ecuación diferencial del superpotencial, sólo que ahora se tiene que el potencial  $V(x) = 0$ , lo que conduce a la siguiente ecuación diferencial:

$$W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx} = -E_0. \quad (4.3.1)$$

Para simplificar los cálculos, se define  $f(x) = \sqrt{2m}W(x)$ , por lo que la ecuación diferencial ahora se ve de la siguiente manera:

$$\frac{1}{2m} f(x)^2 - \frac{\hbar}{2m} \frac{df(x)}{dx} = -E_0. \quad (4.3.2)$$

Esta ecuación diferencial se resuelve de forma directa, por lo que:

$$x = \hbar \int \frac{df}{2mE_0 + f^2(x)} + C. \quad (4.3.3)$$

Esta integral tiene como solución lo siguiente:

$$f(x) = \sqrt{2mE} \cot \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} (x - c) \right), \quad (4.3.4)$$

$$W(x) = -\frac{\hbar\pi}{\sqrt{2ma}} \cot \left( \frac{\pi x}{a} \right) \quad \text{y} \quad W'(x) = \frac{\hbar\pi^2}{\sqrt{2ma^2}} \csc^2 \left( \frac{\pi x}{a} \right), \quad (4.3.5)$$

donde  $a$  es la longitud de la caja. Usando las relaciones supersimétricas entre el superpotencial y los potenciales supersimétricos y algunas identidades trigonométricas se tiene lo siguiente:

$$V_1(x) = -\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad \text{y} \quad V_2(x) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \left[ \cot^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \csc^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right]. \quad (4.3.6)$$

Ahora, se construyen nuestros hamiltonianos supersimétricos, los cuales son:

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \quad (4.3.7)$$

$$H_2 = H_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \csc^2\left(\frac{\pi x}{a}\right). \quad (4.3.8)$$

### 4.3.1. Método tradicional

Para este problema, se utilizan la misma función de onda (2.3.1) y constante de normalización (2.3.3) que se utilizaron para la QM. El valor esperado del hamiltoniano (4.3.7) se calcula de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle H_1 \rangle &= \langle T \rangle + \langle V_1 \rangle, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \psi_v \frac{d^2}{dx^2} \psi_v dx - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \int_0^a \psi_v \frac{d^2}{dx^2} \psi_v dx + \frac{\pi^2}{a^2} \right). \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

Debido a la complejidad de la función de onda, se optó resolver este problema de forma numérica. Las consideraciones numéricas utilizadas fue la de una masa y una caja unitaria ( $m = a = 1$ ). Con estas consideraciones, se procede a variar el parámetro  $b$  y ver dónde se encuentra el valor mínimo de la energía. Al hacer esto, se obtiene la Figura 4.1, la cual permite visualizar rápidamente el mínimo.

Como se puede apreciar, el valor mínimo se encuentra en la región  $0.9 < b < 1$ . Para encontrar un mejor mínimo, se van a utilizar dos cifras significativas para el parámetro  $b$  en la región anteriormente dicha. Bosquejando los valores de la energía en esa región, se tiene la Tabla 4.2.



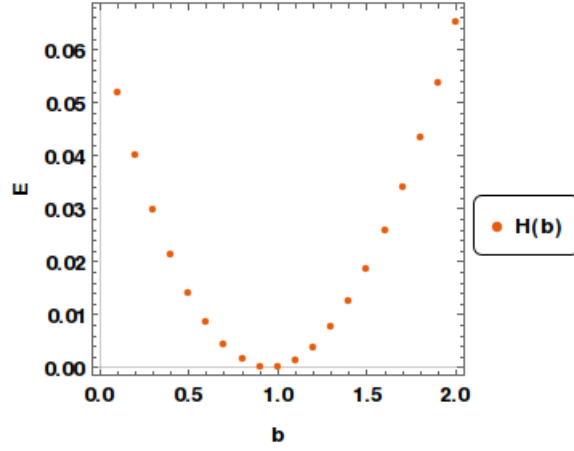


Figura 4.1: Valor esperado de la energía del hamiltoniano  $H_1$  con  $m = a = \hbar = 1$  variando el parámetro  $b$  entre 0.1 y 2.0.

b	$\langle E_0^{(1)} \rangle$
0.9	0.000203
0.91	0.000138
0.92	0.000086
0.93	0.000048
0.94	0.000023
0.95	0.0000111
0.96	0.0000123
0.97	0.000026
0.98	0.000053
0.99	0.000094
1.	0.000147

Tabla 4.2: Tabla donde se presentan algunos posibles valores de  $b$ , y donde se ve que el mínimo se puede encontrar entorno a 0.95

Utilizando  $b = 0.95$ , se puede calcular el valor esperado de la energía variacional obtenida por el método tradicional al usar la definición de  $H_1$  (ecuación (3.1.3)). Esto conduce al siguiente resultado:

$$\begin{aligned}
 \langle H_1 \rangle &= \langle H \rangle - \langle E_0 \rangle, \\
 \langle E_0^{(1)} \rangle &= \langle E \rangle - \langle E_0 \rangle, \\
 0.0000111 &= \langle E \rangle - \frac{\pi^2}{2}, \\
 \langle E \rangle &= \frac{\pi^2}{2} + 0.0000111, \\
 \therefore \langle E \rangle &= 4.93485.
 \end{aligned} \tag{4.3.10}$$

Ahora se procede a calcular el valor del error obtenido por el método tradicional:

$$\left(\frac{E_0 - E}{E_0}\right) 100 \% = 0.00096 \%. \quad (4.3.11)$$

Se puede apreciar que el error obtenido es muy bajo y por ende nuestro resultado es una buena aproximación para una caja de longitud uno y una masa unitaria.

Al igual que en la QM el método simple por incertidumbre no es aplicable a este problema debido a la ausencia de potencial  $V(x)$ .

#### 4.4. Átomo de hidrógeno

En la mecánica cuántica se representa al átomo de hidrógeno por medio de la ecuación de Schrödinger sujeta a un potencial de Coulomb. En esta sección se estudia este problema utilizando la SUSY-QM.

La separación de variables en la ecuación de Schrödinger permite reducir el problema a un sistema unidimensional que cuenta con un potencial efectivo para la coordenada radial.

Al resolver el átomo de hidrógeno, se debe también considerar el potencial efectivo.

Para este problema se propone que el superpotencial tenga la siguiente forma:

$$W(r) = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left( a - \frac{b}{r} \right). \quad (4.4.1)$$

Entonces, se introduce esto en la ecuación diferencial de Riccati y se obtiene como resultado lo siguiente:

$$W^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW}{dr} = V(r) - E_0, \quad (4.4.2)$$

$$\frac{1}{2m} \left( a^2 - \frac{2ab}{r} + \frac{b}{r^2} \right) - \frac{\hbar b}{2mr^2} = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E_0.$$

Si se iguala cada potencia de  $r$  entre sí en cada lado de la ecuación, se encuentra la siguiente solución:

$$a = \frac{\alpha m}{\hbar(l+1)} \quad y \quad b = \hbar(l+1), \quad (4.4.3)$$

en donde  $E_0 = -\frac{a^2}{2m} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}$ . Por lo anterior, el superpotencial es el siguiente:

$$W = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left( \frac{\alpha m}{\hbar(l+1)} - \frac{\hbar(l+1)}{r} \right), \quad (4.4.4)$$

lo que conduce a que los hamiltonianos sean:

$$H_{1,l} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \quad (4.4.5)$$

$$H_{2,l} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2(l+1)(l+2)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}. \quad (4.4.6)$$

Nótese que los primeros tres términos del hamiltoniano compañero son iguales al del primero con la diferencia de que  $l \rightarrow l + 1$ , por lo que se puede reescribir el hamiltoniano compañero de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} H_{2,l} &= H_{1,l+1} - \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+2)^2} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \\ &= H_{1,l+1} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2} \left( \frac{2l+3}{(l+1)^2(l+2)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

Si se repite el procedimiento para los demás hamiltonianos de la jerarquía se puede encontrar la siguiente expresión [15]:

$$\boxed{H_{n+1,l} = H_{1,l+n} + \sum_{i=1}^n \frac{\alpha^2 m [2(l+i-1)+3]}{2\hbar^2(l+i)^2(l+i+1)^2}}. \quad (4.4.8)$$

Cuando se quiere recuperar el estado de  $H_{1,l}$ , no se aplica la suma.

#### 4.4.1. Método tradicional

Para trabajar en éste sistema, se va a recurrir de nuevo a la función de onda variacional (ecuaciones (2.4.1) y (2.4.4)) que se utilizaron en la sección (2.4.1). Además, se debe considerar que en el estado base el momento angular  $l = 0$ . Con lo anterior, se puede proceder a calcular los valores esperados para la energía mínima.

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{\psi^*(x)}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} (\psi(r)) \right) dr = \frac{3b\hbar^2}{2m}, \quad (4.4.9)$$

$$\langle L \rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \int_0^\infty \frac{|\psi(x)|^2}{r^2} dr = 0, \quad (4.4.10)$$

$$\langle V \rangle = -\alpha \int_0^\infty \frac{|\psi(x)|^2}{r} dr = -2\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}, \quad (4.4.11)$$

lo que lleva a que el valor esperado de la energía sea:

$$\langle E_0^{(1)} \rangle = \frac{3b\hbar^2}{2m} - 2\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}. \quad (4.4.12)$$

Ahora, se procede a calcular el valor del parámetro variacional que minimiza la energía.

$$\begin{aligned} \frac{\langle E_0^{(1)} \rangle}{db} &= 0, \\ &= \frac{3\hbar^2}{2m} - \alpha \sqrt{\frac{2}{b\pi}}, \\ \therefore b &= \frac{8m^2\alpha^2}{9\pi\hbar^4}. \end{aligned} \quad (4.4.13)$$

Ahora, sustituyendo el valor del parámetro  $b$  en el hamiltoniano, se obtiene que el valor esperado para nuestra energía mínima es:

$$\begin{aligned}
\langle E_0^{(1)} \rangle &= \frac{3\hbar^2}{2m} \left( \frac{8m^2\alpha^2}{9\pi\hbar^4} \right) - 2\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi} \cdot \frac{8m^2\alpha^2}{9\pi\hbar^4}} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}, \\
&= \frac{4\alpha^2 m}{3\pi\hbar^2} - \frac{8\alpha^2 m}{3\pi\hbar^2} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}, \\
&= -\frac{4\alpha^2 m}{3\pi\hbar^2} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2},
\end{aligned} \tag{4.4.14}$$

$$\boxed{\therefore \langle E_0^{(1)} \rangle = \frac{(3\pi - 8)m\alpha^2}{6\pi\hbar^2}.}$$

Utilizando la definición de  $H_1$  (ecuación (3.1.3)) se puede encontrar el valor de la energía variacional.

$$\begin{aligned}
\langle H_1 \rangle &= \langle H \rangle - \langle E_0 \rangle, \\
\langle E_0^{(1)} \rangle &= \langle E \rangle - \langle E_0 \rangle, \\
\frac{(3\pi - 8)m\alpha^2}{6\pi\hbar^2} &= \langle E \rangle + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2},
\end{aligned} \tag{4.4.15}$$

$$\boxed{\therefore \langle E \rangle = -\frac{4\alpha^2 m}{3\pi\hbar^2}.}$$

Si se transforma este resultado a electronvoltios, se tiene que la energía variacional es:

$$\langle E \rangle = -11.5488eV. \tag{4.4.16}$$

Ahora, con el resultado anterior, se puede proceder a calcular el error obtenido por el método, dicho error es:

$$\left( \frac{E_0 - E}{E_0} \right) 100\% = 15.1174\%. \tag{4.4.17}$$

Del resultado anterior, se puede apreciar que se obtiene un error bajo y con lo cual se puede concluir que el método genera una buena aproximación a la energía del estado base del átomo de hidrógeno.

#### 4.4.2. Método simple por incertidumbre

Dado que los hamiltonianos se encuentran relacionados con el hamiltoniano del estado base (ecuación (4.4.5)), entonces se procede a trabajar sobre dicho hamiltoniano por el método variacional simple por incertidumbre. Se tiene que el hamiltoniano es:

$$\begin{aligned}
H_{1,l} &= \frac{\mathfrak{K}^2 \hbar^2}{8mr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \\
&= \frac{\hbar^2 [\mathfrak{K}^2 + 4l(l+1)]}{8mr^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}.
\end{aligned} \tag{4.4.18}$$

Se procede a minimizar el hamiltoniano con respecto al radio.

$$\begin{aligned} \frac{dH_{1,l}}{dr} = 0 &= -\frac{\hbar^2 [\kappa^2 + 4l(l+1)]}{4mr^3} + \frac{\alpha}{r^2}, \\ \therefore r &= \frac{\hbar^2 [\kappa^2 + 4l(l+1)]}{4m\alpha}. \end{aligned} \quad (4.4.19)$$

Ahora, se procede a sustituir éste resultado en el hamiltoniano y se consigue que la energía mínima es:

$$\begin{aligned} E_0^{(1,l)} &= \frac{a}{2r} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \\ &= -\frac{\alpha}{2r} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \\ &= -\frac{2m\alpha^2}{\hbar^2 [\kappa^2 + 4l(l+1)]} + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(l+1)^2}, \\ &= \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \left[ \frac{1}{2(l+1)^2} - \frac{2}{\kappa^2 + 4l(l+1)} \right], \\ \therefore E_0^{(1,l)} &= \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(l+1)^2} \left[ \frac{\kappa^2 - 4(l+1)}{\kappa^2 + 4l(l+1)} \right]. \end{aligned} \quad (4.4.20)$$

Como se sabe, la energía del estado base es igual a cero, por lo que ahora se debe encontrar el valor del modulador que permite que esto sea cierto.

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(l+1)^2} \left[ \frac{\kappa^2 - 4(l+1)}{\kappa^2 + 4l(l+1)} \right], \\ 0 &= \kappa^2 - 4(l+1), \\ \kappa^2 &= 4(l+1), \\ \boxed{\kappa} &= 2\sqrt{l+1}. \end{aligned} \quad (4.4.21)$$

Sustituyendo el resultado anterior en la ecuación (4.4.19) permite encontrar el valor del radio que minimiza la energía, dicho valor es:

$$r_l = \frac{(l+1)^2 \hbar^2}{m\alpha}. \quad (4.4.22)$$

Se conoce que para el estado base, el momento angular  $l = 0$ , lo que conduce a que el radio que minimiza la energía sea el siguiente.

$$\boxed{r_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha}}. \quad (4.4.23)$$

El resultado anterior es conocido como el radio de Bohr, por lo que se puede concluir que es el radio de Bohr el que minimiza la energía del átomo de hidrógeno.

Utilizando la ecuación (3.1.3) se puede encontrar la energía del estado base del átomo de hidrógeno para la mecánica cuántica convencional.

$$\begin{aligned}
 E_0^{(1)} &= E_v - E_0, \\
 0 &= E_v + \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}, \\
 \therefore E_v &= -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}.
 \end{aligned}
 \tag{4.4.24}$$

El resultado anterior es importante porque se obtiene que la energía variacional del estado base coincide con la solución exacta, por lo que el error obtenida por el método es de 0% con  $\kappa = 2$ .

Si ahora se quieren conocer los siguientes niveles energéticos pertenecientes a la jerarquía se debe usar la ecuación (4.4.8), lo que lleva al siguiente resultado.

$$E_0^{(n+1,l)} = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha^2 m [2(l+i-1)+3]}{2\hbar^2 (l+i)^2 (l+i+1)^2}, \quad n = 1, 2, \dots
 \tag{4.4.25}$$

Si se considera únicamente el caso de  $l = 0$ , se puede ver que la energía variacional para el  $n$ -ésimo estado es:

$$E_{v n} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 n^2}.
 \tag{4.4.26}$$

Este resultado es exactamente igual espectro energético que se obtiene por la solución exacta.

## Conclusiones

A lo largo de esta tesis se realizó un estudio sistemático con los métodos variacionales. Hemos comparado los resultados obtenidos por el método simple por incertidumbre y mediante el método tradicional, trabajando siempre con una función variacional fija. En el caso del método simple por incertidumbre analizamos el efecto del modulador tanto en la mecánica cuántica convencional como en la mecánica cuántica supersimétrica.

Se ha podido observar que el método variacional simple basado en el principio de incertidumbre de Heisenberg es muy efectivo para estimar los órdenes de magnitud de las energías del estado base de diversos sistemas cuánticos. La utilización del principio de incertidumbre es mucho más sencilla que el método tradicional pues no requiere integrales, que en algunos casos pueden llegar a ser muy complejas. El costo de la simplificación en el cálculo es tener una menor precisión al estimar el valor de la energía del estado base.

La limitante que presenta el método simple por incertidumbre es que no se cuenta con una forma de estimar el valor de  $\kappa$  en la QM, razón por la cual se utiliza  $\kappa = 1$  para dichos cálculos. Ésta dificultad desaparece cuando se comienza a utilizar la supersimetría. Esto debido a la factorización del hamiltoniano y a la naturaleza del método que fija el eigenvalor del estado base siempre en cero. Por lo anterior se obtiene un único valor para el modulador que minimiza la energía en el sistema cuántico supersimétrico que se esté trabajando. Además, de las relaciones supersimétricas se puede también observar que el valor del modulador que minimiza un sistema cuántico supersimétrico también minimiza el sistema cuántico convencional correspondiente. Otra de las ventajas de trabajar con la supersimetría es que podemos conocer todo el espectro energético del sistema con tan sólo conocer el del estado base por medio de la jerarquía de hamiltonianos.

Es importante destacar que el principio de incertidumbre no ayuda a calcular correctamente la energía mínima de un sistema si el sistema no cuenta con un potencial (como el caso de la partícula en la caja).

En general el método variacional simple por incertidumbre es exitoso aplicándose a la SUSY-QM, pues no sólo ha permitido calcular con precisión los valores de las energías de los estados base de los diferentes sistemas, sino que también ha permitido conocer de forma directa los valores de la incertidumbre para el momento y posición que minimizan la energía. Para el sistema del átomo de hidrógeno, se encontró que la incertidumbre de la posición coincide con el radio de Bohr.

En general, se puede concluir que la aplicación del principio de incertidumbre, junto con el modulador de incertidumbre como método variacional aplicado a la mecánica cuántica supersimétrica es una herramienta efectiva para estimar la energía del estado base sin realizar integrales complicadas. Es concebible que éste método variacional también permita estimar de forma sencilla otros sistemas cuánticos, tales como el átomo de helio u otros tipos de pozos de potencial.



---

# Bibliografía

- [1] Paul R. Berman. *Introductory Quantum Mechanics: A traditional approach emphasizing connections with classical physics*. Springer, 2018.
- [2] Daniel R. Bes. *Quantum Mechanics: A modern and concise introductory course*. 3ra. Springer, 2012.
- [3] D.I. Blokhintsev. *Quantum Mechanics*. Reidel Publishing Company, 1964.
- [4] Riccardo Borghi. “The variational method in quantum mechanics: an elementary introduction”. En: *European Journal of Physics* 39.3 (2018), pág. 035410. DOI: 10.1088/1361-6404/aaafd9. URL: <https://doi.org/10.1088/1361-6404/aaafd9>.
- [5] CERN. *Supersymmetry*. (s. f.) URL: <https://home.cern/science/physics/supersymmetry> (visitado 29-10-2022).
- [6] Enrique Choreño Ortíz. *Método de factorización de Green en mecánica cuántica*. Instituto Politécnico Nacional, 2016.
- [7] Fred Cooper, Avinash Khare y Uday Sukhatme. *Supersymmetry in Quantum Mechanics*. Uto-Print, 2001.
- [8] J. David y C. Fernández. “Supersymmetric Quantum Mechanics”. En: *AIP Conference Proceedings* 1287.1 (2010), págs. 3-36. DOI: 10.1063/1.3507423. eprint: <https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.3507423>. URL: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3507423>.
- [9] Rainer Dick. *Advanced Quantum Mechanics: Materials and photons*. 2da. Springer, 2016.
- [10] Robert Eisberg y Robert Resnick. *Física Cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. Limusa, S.A., 1979.
- [11] E. Elbaz. *Quantum Theory of particles, Fields and Cosmology*. Springer, 1998.
- [12] Mallow Jeffry y Rasinariu Constantin Gangopadhyaya Asim. *Supersymmetric Quantum Mechanics. An Introduction*. 2da. World Scientific.
- [13] E. Gozzi, M. Reuter y W.D. Thacker. “Variational methods via supersymmetric techniques”. En: *Physics Letters A* 183.1 (1993), págs. 29-32. ISSN: 0375-9601. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)90883-2](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)90883-2). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960193908832>.
- [14] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3ra. Prentice Hall, 1995.
- [15] Johan Gudmundsson. *Supersymmetric Quantum Mechanics*. Lund University, 2014.
- [16] Brian C. Hall. *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer, 2013.

- [17] K.T. Hetch. *Quantum Mechanics*. Springer, 2000.
- [18] José Ignacio Illana. *Teoría Cuántica de Campos*. Universidad de Granada, 2018. URL: <https://www.ugr.es/~jillana/Docencia/TQC/tqc.pdf>.
- [19] L. Infeld y T. E. Hull. “The Factorization Method”. En: *Rev. Mod. Phys.* 23 (1 1951), págs. 21-68. DOI: 10.1103/RevModPhys.23.21. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.23.21>.
- [20] Pieter Kok. *A first introduction to Quantum Physics*. Springer, 2018.
- [21] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Mecánica Cuántica no Relativista [Traducido al español de ]*. Reverté, 1983.
- [22] A. Messiah. *Quantum Mechanics Volume I*. North-Holland, 1961.
- [23] Michael Martin Nieto. “Relationship between supersymmetry and the inverse method in quantum mechanics”. En: *Physics Letters B* 145.3 (1984), págs. 208-210. ISSN: 0370-2693. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(84\)90339-3](https://doi.org/10.1016/0370-2693(84)90339-3). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269384903393>.
- [24] J.J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- [25] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. 2da. Springer, 2008.
- [26] Soldovieri C., T. *INTRODUCCION A LA MECANICA DE LAGRANGE Y HAMILTON*. 1era. El preprint puede ser descargado de la página <http://tsoldovieritsweb.ihostfull.com>. Venezuela: Preprint, 2019.
- [27] “Supersymmetry: what? why? when?” En: *Contemporary Physics* 41.6 (2000), págs. 359-367.
- [28] Moniek Verschuren. *Coherent states in Quantum Mechanics*. Radboud University Nijmegen, 2011.
- [29] B.L. Van der Waerden. *Group Theory and Quantum Mechanics*. Springer.
- [30] Eyvind H. Wichmann. *Física Cuántica: Berkeley physics course-volumen 4*. Reverté, S.A., 1972.
- [31] Václav Zatloukal. *Applications of Supersymmetric Quantum Mechanics. (Tesis de licenciatura)*. Czech Technical University, 2009.