

# Mecánica Cuántica. Tarea 9\*†

José Emmanuel Flores Calderón

Fecha: 02/06/2021.

1. Considera un oscilador armónico isotrópico en dos dimensiones. El Hamiltoniano está dado por

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2).$$

- (a) ¿Cuáles son las energías de los tres estados más bajos? ¿Existe alguna degeneración?  
(b) Apliquemos ahora una perturbación

$$V = \delta m\omega^2 xy,$$

donde  $\delta$  es un número real adimensional mucho más chico que la unidad. Encuentra el eigenket de la energía de orden cero y su correspondiente energía a primer orden para cada uno de los tres estados más bajos.

- (c) Resuelva el problema  $H + V$  exactamente. Compare con el resultado obtenido en (b).

## Solución.

- (a) Expresemos el Hamiltoniano de la siguiente forma

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} y^2, \\ \implies H_0 &= \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} y^2, \\ \therefore H_0 &= H_x + H_y. \end{aligned}$$

Es decir, el Hamiltoniano se separa en dos partes, una que solo involucra a la coordenada  $x$  y otra que solo involucra a la coordenada  $y$ , o dicho de otra forma, se separa en dos osciladores armónicos (en  $x$  y en  $y$ ). Los eigenkets en general están dados por  $|n_x, n_y\rangle$ , mientras que las eigenenergías están dadas por

$$E_n = E_{n_x} + E_{n_y},$$

pero recordemos que  $E_{n_x} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  y  $E_{n_y} = \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ , de modo que

$$E_{n_x, n_y} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega,$$

$$\therefore E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1) \hbar\omega, \quad n_x, n_y \in 0 \cup \mathbb{N}.$$

De modo que el estado base está dado por  $|0, 0\rangle$  con eigenenergía  $E_{0,0} = \hbar\omega$ . Ahora bien, para el segundo estado, es claro que tenemos una doble degeneración, ya que los estados  $|1, 0\rangle$  y  $|0, 1\rangle$ , tienen la misma energía, la cual está dada por  $E_{1,0} = E_{0,1} = 2\hbar\omega$ .

\*Grupo C011 | Trimestre 21-1

†Profesor: Miguel Ángel Bastarrachea Magnani | Ayudante: Yoshua Chávez Bolaños

- (b) Ahora bien, si encendemos la perturbación dada por el potencial  $V = \delta m\omega^2 xy$ , con  $\delta$  la perturbación,. De manera general tenemos que una perturbación a segundo orden para un estado arbitrario  $n$  viene dada por

$$\Delta E_n^{(2)} = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

donde

$$V_{nn} = \langle n_x^{(0)}, n_y^{(0)} | V | n_x^{(0)}, n_y^{(0)} \rangle, \quad \& \quad V_{nk} = \langle n_x^{(0)}, n_y^{(0)} | V | k_x^{(0)}, k_y^{(0)} \rangle.$$

Ahora bien, en el caso del estado base, tenemos que  $n_x = n_y = 0$ , de manera que el corrimiento de energía a primer orden esta dado por

$$\Delta E_0^{(1)} = \lambda V = \delta m\omega^2 \langle 0, 0 | xy | 0, 0 \rangle,$$

pero recordemos que si escribimos a  $x$  y  $y$  en terminos de los operadores de aniquilación y de creación, éstos nos conectan kets diferentes, y en nuestro caso estamos haciendo el promedio con los mismos kets, de modo que

$$\Delta E_0^{(1)} = 0.$$

Ahora bien, para el primer estado escitado es necesario que diagonalicemos la perturbación para el corrimiento de energía a primer orden, pero notemos que

$$\langle 1, 0 | xy | 1, 0 \rangle = \langle 0, 1 | xy | 0, 1 \rangle = 0.$$

Mientras que para los elementos fuera de la diagonal, tenemos que calcular

$$\langle 1, 0 | xy | 0, 1 \rangle \quad \& \quad \langle 0, 1 | xy | 1, 0 \rangle.$$

Pero notemos que  $\langle 1, 0 | xy | 0, 1 \rangle = \langle 0, 1 | xy | 1, 0 \rangle$ , de manera que

$$\begin{aligned} \delta m\omega^2 \langle 1, 0 | xy | 0, 1 \rangle &= \delta m\omega^2 \langle 1, 0 | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{1} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{1} | 0, 1 \rangle = \delta \frac{\hbar\omega}{2}, \\ \implies \delta m\omega^2 \langle 1, 0 | xy | 0, 1 \rangle &= \delta \frac{\hbar\omega}{2}. \end{aligned}$$

Mientras que la condición de diagonalización viene dada por

$$\det [V - (E - E_D^{(0)})] = 0,$$

la cual nos conduce a

$$(\Delta_1^{(1)})^2 - \left(\frac{\delta\hbar\omega}{2}\right)^2 = 0 \implies \Delta_1^{(1)} = \pm \frac{\delta\hbar\omega}{2},$$

de modo que para el primer estado excitado, tenemos que

$$E^1 = 2\hbar\omega + \Delta_1^{(1)} = 2\hbar\omega \pm \frac{\delta\hbar\omega}{2} = \left(2 \pm \frac{\delta}{2}\right) \hbar\omega,$$

junto con los correspondientes eigenkets dados por

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1\rangle \pm |1, 0\rangle).$$

- (c) Ahora bien, para resolver el problema explícitamente, veamos que

$$\begin{aligned} \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) + \delta m\omega^2 xy &= \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + 2\delta xy) = \frac{m\omega^2}{2} [(1 + \delta) (x^2 + y^2) + (1 - \delta) (x^2 - y^2)], \\ \implies \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) + \delta m\omega^2 xy &= \frac{m\omega^2}{2} [(1 + \delta) (x^2 + y^2) + (1 - \delta) (x^2 - y^2)], \end{aligned}$$

si ahora aplicamos una rotación de  $\pi/4$  a los ejes  $x$  y  $y$ . Ahora bien, el resultado de aplicar la transformación anterior nos conduce a las coordenadas normales dadas por

$$x' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y) \quad \& \quad y' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y),$$

con frecuencias respectivas

$$\omega'_x = \omega(1 + \delta)^{1/2} \quad \& \quad \omega'_y = \omega(1 - \delta)^{1/2}.$$

De modo que las eigenenergías vienen dadas por

$$E_{n_x, n_y} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega'_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega'_y.$$

En particular, para el estado base, tenemos

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega'_x + \frac{1}{2} \hbar \omega'_y.$$

Pero como  $\delta$  es pequeño, podemos aproximar a  $\omega'_x$  y  $\omega'_y$  como

$$\omega'_x \approx \omega \left(1 + \frac{\delta}{2}\right) \quad \& \quad \omega'_y \approx \omega \left(1 - \frac{\delta}{2}\right),$$

de manera que

$$E_0 \approx \frac{\hbar \omega}{2} \left[ \left(1 + \frac{\delta}{2}\right) + \left(1 - \frac{\delta}{2}\right) \right] = \hbar \omega,$$

$$\implies E_{00} \approx \hbar \omega.$$

Ahora bien, para el estado  $|1, 0\rangle$ , tenemos que

$$E_{1,0} = \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega'_x + \frac{1}{2} \hbar \omega'_y = \frac{3}{2} \hbar \omega'_x + \frac{1}{2} \hbar \omega'_y \approx \frac{3}{2} \hbar \omega \left(1 + \frac{\delta}{2}\right) + \frac{1}{2} \hbar \omega \left(1 - \frac{\delta}{2}\right),$$

$$\implies E_{1,0} \approx \frac{3}{2} \hbar \omega + \frac{3}{4} \hbar \omega \delta + \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{1}{4} \hbar \omega \delta = \frac{4}{2} \hbar \omega + \frac{2}{4} \hbar \omega \delta,$$

$$\therefore E_{1,0} \approx \left(2 + \frac{1}{2} \delta\right) \hbar \omega.$$

Finalmente, para el estado  $|0, 1\rangle$ , tenemos

$$E_{0,1} = \frac{1}{2} \hbar \omega'_x + \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega'_y \approx \frac{1}{2} \hbar \omega \left(1 + \frac{\delta}{2}\right) + \frac{3}{2} \hbar \omega \left(1 - \frac{\delta}{2}\right),$$

$$\implies E_{0,1} \approx \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{1}{4} \hbar \omega \delta + \frac{3}{2} \hbar \omega - \frac{3}{4} \hbar \omega \delta = \frac{4}{2} \hbar \omega - \frac{2}{4} \hbar \omega \delta,$$

$$\therefore E_{0,1} \approx \left(2 - \frac{1}{2} \delta\right) \hbar \omega.$$

justo como se obtuvo usando el método perturbativo.

- Un átomo de un electrón cuyo estado base no está degenerado se coloca en un campo eléctrico uniforme que va en la dirección  $z$ . Obtén una expresión aproximada para el momento dipolar inducido del estado base considerando el valor esperado de  $ez$  con respecto al vector del estado perturbado calculado a primer orden. Muestra que la misma expresión puede obtenerse también del cambio de energía  $\Delta = -\alpha |\mathbf{E}|^2 / 2$  del estado base calculado a segundo orden. (Nota:  $\alpha$  es la polarizabilidad). Ignora el espín.

**Solución.**

De la teoria de perturbaciones sabemos que la aproximación a segundo orden, para un ket arbitrario esta dada por

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \lambda^2 \left( \sum_{k \neq n} \sum_{l \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kl} V_{nl}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right), \quad (0.1)$$

si solo condieramos la aproximación a primer orden, para el  $|nlm\rangle$ , tenemos que

$$|nlm\rangle = |nlm^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} |nlm^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

en nuestro caso, tenemos el estado base, de manera que  $n = 1, l = 0, m = 0$ , entonces

$$|100\rangle = |100^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{nlm} |nlm^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}}.$$

Recordemos que  $V_{nk} = V_{kn} = \langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle$ , y en nuestro caso  $V = e |\mathbf{E}| z$ , de modo que

$$|100\rangle = |100^{(0)}\rangle + e |\mathbf{E}| \sum_{nlm} |nlm^{(0)}\rangle \frac{\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}}.$$

Ahora bien, para encontrar el valor esperado del momento dipolar electrico al orden mas bajo diferente de cero, usemos que

$$\langle 100^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle = 0,$$

de modo que, usando la ecuación (0.1), tenemos que

$$\langle 100^{(1)} | = \langle 100^{(0)} | + e |\mathbf{E}| \sum_{nlm} \langle nlm^{(0)} | \frac{\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}},$$

con lo cual,  $\langle 100^{(1)} | ez | 100^{(1)} \rangle$ , viene dado por

$$\begin{aligned} \langle 100^{(1)} | ez | 100^{(1)} \rangle &= -e^2 |\mathbf{E}| \left[ \sum_{nlm} \langle 100^{(0)} | z | nlm \rangle \frac{\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} + \langle 100^{(0)} | z | nlm \rangle \frac{\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle^*}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \right], \\ \Rightarrow \langle 100^{(1)} | ez | 100^{(1)} \rangle &= -e^2 |\mathbf{E}| \left[ \sum_{nlm} \frac{|\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} + \frac{|\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \right], \\ \therefore \langle 100^{(1)} | ez | 100^{(1)} \rangle &= -2e^2 |\mathbf{E}| \left( \sum_{nlm} \frac{|\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \right). \end{aligned}$$

Si ahora definimos a  $\alpha$  como

$$\alpha = -2e^2 \left( \sum_{nlm} \frac{|\langle nlm^{(0)} | z | 100^{(0)} \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \right),$$

tenemos que

$$\langle 100^{(1)} | ez | 100^{(1)} \rangle = \alpha |\mathbf{E}|.$$

3. Un electrón p-orbital caracterizado por  $|n, l = 1, m = \pm 1, 0\rangle$  (ignorando el espín) está sujeto a un potencial

$$V = \lambda (x^2 + y^2),$$

con  $\lambda$  constante.

- (a) Obtén el eigenestado de energía de orden cero que diagonaliza la perturbación. No necesitas evaluar el cambio de energía en detalle sino mostrar que la triple degeneración original está ahora completamente removida.
- (b) Dado que  $V$  es invariante bajo inversión temporal y porque ya no hay degeneración, esperamos que cada uno de los eigenestados obtenidos en (a) se transformen en sí mismos (excepto un factor de fase o signo) bajo inversión temporal. Revisa este punto explícitamente.

**Solución.**

- (a) En coordenadas esfericas, tenemos que

$$x^2 - y^2 = r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) = r^2 \sin^2 \theta \cos 2\phi = r^2 \sin^2 \theta \left( \frac{e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}}{2} \right).$$

Usando que

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2 \theta) e^{\pm 2i\phi},$$

lo cual nos dice que  $V$  se puede escribir como una combinación de  $Y_2^{\pm 2}$ , es decir, es la suma de los operadores tensoriales  $T_2^{\pm 2}$ . Por lo tanto, usando que

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = 0,$$

a menos que  $m' = q + m$ , tenemos que la perturbación solo conecta los estados con  $m$  diferidos por dos unidades. Ahora bien las integrales

$$I = \frac{\lambda}{2} \int \sin^2 \theta e^{\pm \phi} e^{\mp 2i\phi} \sin^2 \theta e^{\pm \phi} d\Omega \int r^2 R_{n1}^2 r^2 dr$$

son las mismas para los casos que conectan a  $m = \pm 1$  con  $m = \mp 1$ , respectivamente, de modo que si etiquetamos a los estados por  $m = 1, 0, -1$ , tenemos que la perturbación viene dada por

$$V = \begin{bmatrix} 0 & 0 & I \\ 0 & 0 & 0 \\ I & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \& \quad |n10\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} [|n11\rangle \pm |n1, -1\rangle]$$

son los eigentestados correctos a orden cero.

- (b) Ahora bien el operador de inversion temporal  $\Theta$  nos dice que

$$\Theta |l, m\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle,$$

de modo que bajo inversión temporal un ket de estado  $|l, m\rangle$  va al estado  $|l, -m\rangle$  salvo una fase de  $(-1)^m$ , de manera que van o se transforman en sí mismos.

4. Utiliza el método variacional para encontrar la energía del estado base del átomo de helio, i.e., del Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - Z \frac{e^2}{r_1} - Z \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|},$$

utilizando como funciones de prueba la función hidrogenoide

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-Z'(r_1+r_2)/a_0}.$$

Con  $Z$  el parámetro variacional y donde los índices 1, 2 se refieren a los dos electrones del átomo. Interpreta físicamente el valor óptimo de  $Z$  encontrado.

**Solución.**

El método variacional nos permite calcular una estimación de la energía del estado base dada un ket de prueba  $|\tilde{0}\rangle$ . Esto es, se satisface el siguiente teorema

$$E_0 \leq \bar{H},$$

donde

$$\bar{H} = \frac{\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle}.$$

Si expresamos la ecuación anterior en la base de posición, tenemos que

$$\bar{H} = \frac{\int d\mathbf{x} \langle \tilde{0} | \mathbf{x} \rangle H \langle \mathbf{x} | \tilde{0} \rangle}{\int d\mathbf{x} \langle \tilde{0} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \tilde{0} \rangle}. \quad (0.2)$$

En nuestro caso, tenemos que

$$\langle \mathbf{x} | \tilde{0} \rangle = \psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\lambda^3}{\pi a_0^3} e^{-\lambda(r_1+r_2)/a_0},$$

donde he hecho el cambio de notación  $\lambda = Z'$ . Ahora bien, calculemos  $H\psi$

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - Z \frac{e^2}{r_1} - Z \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \psi.$$

Debido a la simetría del problema, el operador laplaciano es conveniente escribirlo en coordenadas esféricas, pero es claro que en la función de prueba solo tenemos dependencia en la coordenada radial, de modo que el laplaciano se transforma en la segunda derivada respecto a  $r$

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} - Z \frac{e^2}{r_1} - Z \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \frac{\lambda^3}{\pi a_0^3} e^{-\lambda(r_1+r_2)/a_0},$$

y al calcular las derivadas, tenemos que

$$H\psi = \frac{\lambda^3}{\pi a_0^3} \left( -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\lambda^2}{a_0} - Z \frac{e^2}{r_1} - Z \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) e^{-\lambda(r_1+r_2)/a_0}.$$

De manera que la integral toma la forma  $\int d\mathbf{x} \langle \tilde{0} | \mathbf{x} \rangle H \langle \mathbf{x} | \tilde{0} \rangle$

$$\int d\mathbf{x} \langle \tilde{0} | \mathbf{x} \rangle H \langle \mathbf{x} | \tilde{0} \rangle = \left( \frac{\lambda^3}{\pi a_0^3} \right)^2 \int d\mathbf{x} \left( -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\lambda^2}{a_0} - Z \frac{e^2}{r_1} - Z \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) e^{-2\lambda(r_1+r_2)/a_0}$$

5. Estima la energía del estado base del átomo de hidrogeno utilizando las funciones variacionales

$$u_1 = \rho e^{-\lambda \rho},$$

$$u_2 = \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2},$$

$$u_3 = \rho^2 e^{-\lambda \rho},$$

donde  $\rho = r/a_0$ ,  $a_0 = \hbar/me^2$ ,  $E_0 = me^4/2\hbar$  y  $\lambda$  es el parámetro variacional. Compara los resultados para discernir cuál de estas funciones de prueba da mejor estimación para la energía del estado base.

**Solución.**

La parte radial del Hamiltoniano del átomo de hidrogeno esta dada por

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2},$$

pero en el estado base, tenemos que  $l = 0$ , de manera que la parte radial del Hamiltoniano queda escrita como

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Con la expresión anterior, calculemos  $Hu_1, Hu_2, Hu_3$ :

$$\begin{aligned} H_ru_1 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \rho e^{-\lambda\rho}, \\ \Rightarrow H_ru_1 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \rho e^{-\lambda\rho}. \end{aligned}$$

Si repetimos el mismo procedimiento para  $Hu_2, Hu_3$ , tenemos

$$\begin{aligned} H_ru_2 &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{4\lambda^2}{(\lambda^2 + \rho^2)^2} - \frac{2}{\lambda^2 + \rho^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2}, \\ Hu_3 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \rho^2 e^{-\lambda\rho}. \end{aligned}$$

Ahora bien, para la normalización de las funciones de prueba, recordemos que  $\rho = r/a_0$ , de modo que  $d\rho = dr/a_0 \Rightarrow dr = a_0 d\rho$ , con lo cual quedan escritas como

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \int_0^\infty dr (u_1)^2 = a_0 \int d\rho (\rho e^{-\lambda\rho})^2, \\ \alpha_2 &= \int_0^\infty dr (u_2)^2 = a_0 \int d\rho \left( \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2} \right)^2 \\ \alpha_3 &= \int_0^\infty dr (u_3)^2 = a_0 \int d\rho (\rho^2 e^{-\lambda\rho})^2. \end{aligned}$$

De modo que  $\alpha_1, \alpha_2$  y  $\alpha_3$  están dadas por

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= a_0 \left( -\frac{\exp(-2\lambda\rho)}{4\lambda^3} (1 + 2\lambda\rho + 2\lambda^2\rho^2) \right) \Big|_0^\infty = \frac{a_0}{4\lambda^3}, \\ &\Rightarrow \alpha_1 = \frac{a_0}{4\lambda^3}. \\ \alpha_2 &= a_0 \left( -\frac{\rho}{2(\lambda^2 + \rho^2)} + \frac{1}{2\lambda} \arctan\left(\frac{\rho}{\lambda}\right) \right) \Big|_0^\infty = \frac{a_0\pi}{4\lambda}, \\ &\Rightarrow \alpha_2 = \frac{a_0\pi}{4\lambda}. \\ \alpha_3 &= a_0 \left( -\frac{\exp(-2\lambda\rho)}{4\lambda^5} (3 + 6\lambda\rho + 6\lambda^2\rho^2 + 4\lambda^3\rho^3 + 2\lambda^4\rho^4) \right) \Big|_0^\infty = \frac{3a_0}{4\lambda^5}, \\ &\Rightarrow \alpha_3 = \frac{3a_0}{4\lambda^5}. \end{aligned}$$

Ahora bien, para  $u_1$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr u_1 H_ru_1 &= \int_0^\infty dr \rho e^{-\lambda\rho} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \rho e^{-\lambda\rho}, \\ \Rightarrow \int_0^\infty dr \rho e^{-\lambda\rho} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \rho e^{-\lambda\rho} &= a_0 \int_0^\infty d\rho \left[ \rho^2 e^{-2\lambda\rho} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{a_0 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\rho} \right) \right], \end{aligned}$$

si ahora hacemos  $\eta_1 = \frac{\hbar^2}{2m}$  y  $\eta_2 = \frac{a_0 e^2}{4\pi\epsilon_0}$ , tenemos que

$$\int_0^\infty dr u_1 H_r u_1 = a_0 \int d\rho \left[ \rho^2 e^{-2\lambda\rho} \left( -\eta_1 \rho^2 - \eta_2 \frac{1}{\rho} \right) \right],$$

con lo cual

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr u_1 H_r u_1 &= -a_0 \frac{\exp(-2\lambda\rho)}{4\lambda^5} \left[ -\eta_2 \lambda^3 (1 + 2\lambda\rho) - \eta_1 (3 + 6\lambda\rho + 6\lambda^2 \rho^2 + 4\lambda^3 \rho^3 + 2\lambda^4 \rho^4) \right] \Big|_0^\infty, \\ \implies \int_0^\infty dr u_1 H_r u_1 &= -\frac{a_0}{4\lambda^5} (2\eta_1 + \eta_2 \lambda^3) \end{aligned}$$

de modo que para  $u_1$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \frac{-\frac{a_0}{4\lambda^5} (2\eta_1 + \eta_2 \lambda^3)}{\frac{a_0}{4\lambda^3}}, \\ \implies \bar{H} &= -\frac{(2\eta_1 + \eta_2 \lambda^3)}{\lambda^2}, \end{aligned}$$

Si ahora derivamos la ecuación anterior respecto a  $\lambda$ , tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} &= -\frac{[3\eta_2 \lambda^2 (a_0 \lambda^2) - (2\eta_1 + \eta_2 \lambda^3) (2a_0 \lambda)]}{\lambda^4} = -\frac{3\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4} + \frac{4\eta_1 \lambda + 2\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4}, \\ \implies \frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} &= -\frac{3\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4} + \frac{4\eta_1 \lambda + 2\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4} \end{aligned}$$

y si ahora imponemos la condición  $\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = 0$ , tenemos que

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{3\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4} + \frac{4\eta_1 \lambda + 2\eta_2 \lambda^4}{\lambda^4} = -3\eta_2 + 2\eta_2 + \frac{4\eta_1}{\lambda^3}, \\ \implies \frac{4\eta_1}{\lambda^3} &= 3\eta_2 - 2\eta_2 \implies \lambda^3 = \frac{4\eta_1}{3\eta_2 - 2\eta_2}, \\ \therefore \lambda &= \left( \frac{4\eta_1}{3\eta_2 - 2\eta_2} \right)^{1/3}. \end{aligned}$$

Ahora bien, para  $u_2$ , tenemos

$$\int_0^\infty dr u_2 H_r u_2 = \int_0^\infty dr \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{4\lambda^2}{(\lambda^2 + \rho^2)^2} - \frac{2}{\lambda^2 + \rho^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0 \frac{r}{a_0}} \right] \left( \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2} \right)^2,$$

ahora bien, hagamos  $\beta_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}$  y  $\beta_2 = -\frac{e^2}{4\pi a_0 \epsilon_0}$ , con lo cual

$$\int_0^\infty dr u_2 H_r u_2 = a_0 \int_0^\infty d\rho \left[ \beta_1 \left( \frac{4\lambda^2}{(\lambda^2 + \rho^2)^2} - \frac{2}{\lambda^2 + \rho^2} \right) + \beta_2 \frac{1}{\rho} \right] \left( \frac{\rho}{\lambda^2 + \rho^2} \right)^2,$$

haciendo la integral, tenemos que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr u_2 H_r u_2 &= a_0 \left( \frac{4\beta_1 \rho^3 - 3\beta_2 (\lambda^2 + \rho^2)^2}{6 (\lambda^2 + \rho^2)^3} \right) \Big|_0^\infty = \frac{3a_0 \beta_2 \lambda^2}{6 (\lambda^2)^3} = \frac{a_0 \beta_2}{2\lambda^4}, \\ \implies \int_0^\infty dr u_2 H_r u_2 &= \frac{a_0 \beta_2}{2\lambda^4}, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\bar{H} = \frac{\frac{a_0 \beta_2}{2\lambda^4}}{\frac{a_0 \pi}{4\lambda}} = \frac{2\beta_2}{\lambda^3},$$



desde este punto es evidente que  $\lambda = 0$ .

Finalmente, para  $u_3$ , se tiene que

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 &= \int_0^\infty dr \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) (\rho^2 e^{-\lambda\rho})^2 = a_0 \int_0^\infty d\rho \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0 \frac{r}{a_0}} \right) (\rho^2 e^{-\lambda\rho})^2, \\ &\implies \int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 = a_0 \int_0^\infty d\rho \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi a_0 \epsilon_0} \frac{1}{\rho} \right) \rho^4 e^{-2\lambda\rho},\end{aligned}$$

si ahora hacemos  $\gamma_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}$  y  $\gamma_2 = \frac{e^2}{4\pi a_0 \epsilon_0}$ , tenemos que

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 &= a_0 \int_0^\infty d\rho \left( \gamma_1 \rho^2 + \gamma_2 \frac{1}{\rho} \right) \rho^4 e^{-2\lambda\rho} = a_0 \int_0^\infty d\rho \left( \gamma_1 \rho^6 e^{-2\lambda\rho} + \gamma_2 \rho^3 e^{-2\lambda\rho} \right), \\ &\implies \int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 = a_0 \int_0^\infty d\rho \left( \gamma_1 \rho^6 e^{-2\lambda\rho} + \gamma_2 \rho^3 e^{-2\lambda\rho} \right).\end{aligned}$$

Haciendo la integral, tenemos que

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 &= a_0 \frac{e^{-2\lambda\rho}}{8\lambda^7} \left( -\gamma_2 \lambda^3 (3 + 6\lambda\rho + 6\lambda^2\rho^2 + 4\lambda^3\rho^3) \right) \Big|_0^\infty \\ &- \frac{a_0 \gamma_1}{8\lambda^7} e^{-2\lambda\rho} (45 + 90\lambda\rho + 90\lambda^2\rho^2 + 60\lambda^3\rho^3 + 30\lambda^4\rho^4 + 12\lambda^5\rho^5 + 4\lambda^6\rho^6) \Big|_0^\infty, \\ &\implies \int_0^\infty dr u_3 H_r u_3 = \frac{a_0}{8\lambda^7} (3\gamma_2 \lambda^3 + 45\gamma_1),\end{aligned}$$

de manera que

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \frac{\frac{a_0}{8\lambda^7} (3\gamma_2 \lambda^3 + 45\gamma_1)}{\frac{3a_0}{4\lambda^5}} = \frac{(3\gamma_2 \lambda^3 + 45\gamma_1)}{2\lambda^2}, \\ &\implies \bar{H} = \frac{(3\gamma_2 \lambda^3 + 45\gamma_1)}{2\lambda^2}.\end{aligned}$$

Finalmente, calculemos la derivada de la ecuación anterior respecto a  $\lambda$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = \frac{16\gamma_2 \lambda^4 - 4\lambda (3\gamma_2 \lambda^3 + 45\gamma_1)}{4\lambda^4} = \frac{28\gamma_2 \lambda^4 - 180\gamma_1 4\lambda}{4\lambda^4},$$

y ahora, usando la condición  $\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = 0$ , tenemos que

$$\begin{aligned}0 &= \frac{28\gamma_2 \lambda^4 - 180\gamma_1 4\lambda}{4\lambda^4} = 7\gamma_2 - \frac{45\gamma_1}{\lambda^3}, \\ &\implies 7\gamma_2 - \frac{45\gamma_1}{\lambda^3} = 0 \implies \lambda^3 = \frac{45\gamma_1}{7\gamma_2}, \\ &\therefore \lambda = \left( \frac{45\gamma_1}{7\gamma_2} \right)^{1/3}.\end{aligned}$$