Ejercicio 1 - Segundo Parcial - Rotaciones

La parte angular de la función de onda de un rotor rígido con un Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2$$

está dada por

$$\langle \theta, \phi | \psi(0) \rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin(\theta)\sin(\phi).$$

a) Halle $\langle \theta, \phi | \psi(t) \rangle$. *Sugerencia: utilice los armónicos esféricos.*

c) ¿Cuál es el valor de $\langle \hat{L}_y \rangle$?

d) Si se mide $\hat{L}_x$ a tiempo $t = 0$, ¿Qué resultados pueden obtenerse y con qué probabilidad?

Resolución

a) Escribiendo $\sin(\phi)$ como exponenciales, se obtiene

$$\langle \theta, \phi | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[Y_1^1(\theta, \phi) + Y_1^{-1}(\theta, \phi) \right].$$

Entonces,

$$\langle \theta, \phi | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[Y_1^1(\theta, \phi) + Y_1^{-1}(\theta, \phi) \right] \, e^{-\frac{i\hbar}{I}t}.$$

En forma de kets,

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle \right) \, e^{-\frac{i\hbar}{I}t}, \tag{1}$$

donde los kets son los autoestados de $\hat{L}_z$.

b) Escribimos $\hat{L}_y$ como $\frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$ y calculamos:

$$\langle \hat{L}_y \rangle = \frac{1}{2i} \left(\langle \hat{L}_+ \rangle - \langle \hat{L}_- \rangle \right) = 0. \tag{2}$$

c) Se puede resolver de dos formas distintas, a la F4 o a la FT2. Detallo ambas a continuación.

F4

Calculamos el valor medio como

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \int d\Omega \, \langle \theta, \phi | \psi(t) \rangle^* \, \hat{L}_x \, \langle \theta, \phi | \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} i\hbar \int d\Omega \, \left(Y_1^1 + Y_1^{-1} \right)^* \left[\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} + \cos(\phi)\frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi} \right] \left(Y_1^1 + Y_1^{-1} \right)$$

$$= -\frac{3i\hbar}{4\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\phi)\cos(\phi) d\phi \, \int_0^{\pi} \sin^2(\theta) d\theta = 0.$$

Usamos esto de la siguiente forma:

$$0 = \langle \hat{L}_x \rangle = \hbar \,\mathrm{Prob}\,(\hbar) + 0\,\mathrm{Prob}(0) - \hbar \mathrm{Prob}\,(-\hbar) \quad \Rightarrow \quad \mathrm{Prob}\,(\hbar) = \mathrm{Prob}\,(-\hbar)\,.$$

Como la suma de todas las probabilidades es igual a 1, me alcanza con saber Prob(0). Para esto, buscamos el autovector de $\hat{L}_x$ con autovalor nulo resolviendo la ecuación diferencial y proyectamos sobre nuestro estado. Buscamos $F(\theta, \phi)$ tal que

$$\left[\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos(\phi)\frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] F(\theta,\phi) = 0.$$

Proponemos $F(\theta, \phi) = A(\theta)B(\phi)$, reemplazamos y llegamos a

$$\frac{1}{A}\frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta)}\frac{dA}{d\theta} + \frac{1}{B}\frac{\cos(\phi)}{\sin(\phi)}\frac{dB}{d\theta} = 0.$$

Por lo tanto, existe una constante k tal que

$$\begin{cases} \dfrac{1}{A}\dfrac{\sin(\theta)}{\cos(\theta)}\dfrac{dA}{d\theta} = k \\ \dfrac{1}{B}\dfrac{\cos(\phi)}{\sin(\phi)}\dfrac{dB}{d\theta} = -k. \end{cases}$$

Es claro entonces que

$$\begin{cases} A(\theta) = \sin^k(\theta) \\ B(\phi) = \cos^k(\phi) \end{cases} \Rightarrow \quad F_k(\theta,\phi) = C(k)\sin^k(\theta)\cos^k(\phi),$$

donde $C(k)$ es una constante que depende de k y se obtiene por normalización. Para encontrar la densidad de probabilidad de obtener 0, proyectamos nuestra función en $F_k(\theta, \phi)$ (hacemos el producto interno):

$$\begin{aligned} (F_k, \psi(t)) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, C^*(k)\, e^{-\frac{i\hbar}{I}t} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\theta} \sin^2(\theta)d\theta\, \left[Y_1^1(\theta,\phi) + Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right] \sin^k(\theta)\cos^k(\phi) \\ &= \sqrt{\frac{4}{\sqrt{4\pi}}}\, C^*(k)\, e^{-\frac{i\hbar}{I}t} \int_0^{2\pi} \sin(\phi)\cos^k(\phi)d\phi \int_0^{\pi} \sin^{k+3}(\theta)d\theta \\ &= \sqrt{\frac{4}{\sqrt{4\pi}}}\, C^*(k)\, e^{-\frac{i\hbar}{I}t} \int_0^{\pi} \sin^{k+3}(\theta)d\theta \left[-\frac{1}{k+1}\cos^{k+1}(\phi)\Big|_0^{2\pi}\right] = 0. \end{aligned}$$

Como la proyección es cero, la probabilidad de obtener ese estado es nula. Por lo tanto, puedo obtener $\hbar$ y $-\hbar$, ambos con probabilidad $\frac{1}{2}$. Espero que nadie lo haya hecho de esta forma.

FT2

Usando que

$$\hat{L}_x = \mathcal{D}^\dagger\left(\hat{y}, \frac{\pi}{2}\right)\hat{L}_z\mathcal{D}\left(\hat{y}, \frac{\pi}{2}\right) \quad \mathcal{D}\left(\hat{y}, \frac{\pi}{2}\right) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{L}_y},$$

se prueba que
$$|l,m\rangle_x = \mathcal{D}^\dagger\left(\hat{y},\frac{\pi}{2}\right)\,|l,m\rangle$$
es autoestado de $\hat{L}_x$ con autovalor m, si $|l,m\rangle$ es autoestado de $\hat{L}_z$ con autvalor m. Luego,
$$\langle\theta,\phi|l,m\rangle_x = \sum_{m'=-l}^{l}\langle\theta,\phi|l,m'\rangle\langle l,m'|e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{L}_y}|l,m\rangle = \sum_{m'=-l}^{l} d^l_{m',m}\left(-\frac{\pi}{2}\right)\,Y_l^{m'}(\theta,\phi).$$
Especificando el caso $l=1$ y usando la relación $d^l_{m',m}=(-1)^{m-m'}\,d^l_{m,m'}=d^l_{-m,-m'}$ vemos que
$$\langle\theta,\phi|1,1\rangle_x = \frac{1}{2}\,Y_1^1(\theta,\phi)-\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0(\theta,\phi)+\frac{1}{2}\,Y_1^{-1}(\theta,\phi),$$
$$\langle\theta,\phi|1,0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[Y_1^1(\theta,\phi)-Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right]\quad \text{y}$$
$$\langle\theta,\phi|1,-1\rangle_x = \frac{1}{2}\,Y_1^1(\theta,\phi)+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0(\theta,\phi)+\frac{1}{2}\,Y_1^{-1}(\theta,\phi).$$
Sumando el primero y tercero, obtenemos que
$$\langle\theta,\phi|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle\theta,\phi|1,1\rangle_x+\langle\theta,\phi|1,-1\rangle_x\right]\,e^{-\frac{i\hbar}{I}t}.$$
Escrito como ket queda
$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle_x+|1,-1\rangle_x\right)\,e^{-\frac{i\hbar}{I}t}.$$
Finalmente, es trivial ver que se puede obtener $\hbar$ y $-\hbar$, ambos con probabilidad $\frac{1}{2}$.