Repaso de momento angular orbital - Armónicos esféricos

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \longrightarrow \vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar\left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \hat{\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk}\, \hat{L}_k$$

Como el algebra de los $\hat{\vec{L}}$ es $su(2)$:

$[\hat{L}^2, L_i] = 0$ (lo probó David para $\vec{J}$)

$\Rightarrow \exists\ |l\,m\rangle \quad l \in \mathbb{N}$ y $-l \leq m \leq l$

$$\hat{L}^2 |l,m\rangle = \hbar^2\, l(l+1)\, |l,m\rangle$$

$$\hat{L}_z |l,m\rangle = \hbar\, m\, |l,m\rangle$$

Recordamos de la clase 20/08 (Átomo de hidrógeno)

con un potencial central, las soluciones estacionarias de $\hat{H}$ pueden separarse en

$R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$

$Y_l^m(\theta,\varphi)$ soluciones de la ecuación dif

$$\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] = -l(l+1)$$

con separación de variables en θ y φ y otras cosas:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) \underset{\substack{\uparrow \\ m>0}}{=} (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-|m|)!}{4\pi\,(l+|m|)!}}\; e^{im\varphi}\, \underbrace{P_l^m(\cos\theta)}_{\text{polinomios de Legendre}}$$

Para vincular las dos cosas (Armónicos esféricos y momento angular)

$$\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}} = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = \hat{L}^2$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2\, l(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Además $\hat{L}_z = \hat{\vec{L}}\cdot\hat{z} = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\hat{z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\hat{L}_z\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar\, m\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$\Rightarrow$ los armónicos esféricos son la representación en coordenadas espaciales de los autoestados de $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$ con autovalores dados por l, m ($|l,m\rangle$)

$$\boxed{\langle\hat{n}\,|\,l,m\rangle = Y_l^m(\theta,\varphi)}$$ con $\hat{n} = (\operatorname{sen}\theta\cos\varphi,\ \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi,\ \cos\theta)$

Ejercicio 58

58 Construya los armónicos esféricos $Y_{1,m} \in L^2(S^2)$. Para ello, resuelva primero $L_+Y_{1,1} = 0$ (L_+ en la representación de coordenadas) y aplique luego el operador L_- a $Y_{1,1}$ (previamente normalizado) para hallar los otros dos restantes. Usando los resultados del problema anterior, escriba la combinación lineal de éstos que es autoestado de L_y con autovalor $\hbar$. Verifique su resultado aplicándole L_y en la representación de coordenadas.

$\ell = 1$

$m = -1, 0, 1$

$-\ell \leq m \leq \ell$

problema 54)

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y$$

$$\Rightarrow \quad \hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \qquad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

$$y \quad \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}\,|\ell, m\pm1\rangle$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\hat{x} = -i\hbar\left(-\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\hat{y} = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\theta} &= \cos\theta\cos\varphi\,\hat{x} + \cos\theta\operatorname{sen}\varphi\,\hat{y} - \operatorname{sen}\theta\,\hat{z}\\ \hat{\varphi} &= -\operatorname{sen}\varphi\,\hat{x} + \cos\varphi\,\hat{y}\end{aligned}}$$

$$\hat{L}_+ Y_1^1(\theta,\varphi) = 0$$

$$\cancel{\hbar e^{i\varphi}}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]Y_1^1(\theta,\varphi) = 0$$

$$\tan\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y_1^1(\theta,\varphi) = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_1^1(\theta,\varphi) = \text{una constante}$$

$$\Rightarrow \quad Y_1^1(\theta,\varphi) = f(\varphi)\,g(\theta)$$

$$\hat{L}_z Y_1^1(\theta,\varphi) = 1\cdot\hbar\, Y_1^1(\theta,\varphi)$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}f(\varphi)\cancel{g(\theta)} = 1\cdot\hbar\cdot f(\varphi)\cancel{g(\theta)} \Rightarrow f(\varphi) = e^{i\varphi}$$

$$Y_1^1(\theta,\varphi) = e^{i\varphi}\cdot g(\theta) \qquad \text{reemplazando esto en } L_+ Y_1^1(\theta,\varphi) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}e^{i\varphi}g(\theta) + i\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{i\varphi}g(\theta) = 0$$

$$\cancel{e^{i\varphi}}\left[\frac{d}{d\theta}g(\theta) - \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}g(\theta)\right] = 0$$

$$\frac{dg}{g} = \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}d\theta \longrightarrow \int\frac{dg}{g} = \int\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}d\theta \overset{u=\operatorname{sen}\theta}{=} \int\frac{1}{u}du$$

$$\ln(g) = \ln(u) + C$$

$$\Rightarrow \quad g(\theta) = u \cdot \underbrace{e^{C}}_{\equiv N} = N \cdot \operatorname{sen}\theta$$

$$Y_1^1(\theta,\varphi) = N \cdot \operatorname{sen}\theta \cdot e^{i\varphi}$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \underbrace{\operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\varphi}_{d\Omega} \; |Y_1^1(\theta,\varphi)|^2 = 1$$

$$|N|^2 = \frac{3}{8\pi}$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} d\theta \, d\varphi \; |N|^2 \cdot \operatorname{sen}^3\theta = \frac{8\pi}{3} |N|^2 = 1 \Rightarrow N = \pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$$

$$\boxed{Y_1^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \, e^{i\varphi} \operatorname{sen}\theta}$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi) \qquad Y_1^{-1}(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_-|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)} \; |l,m-1\rangle$$

$\hookrightarrow$ representación en coordenadas

$$\hat{L}_- Y_1^1(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{2} \; Y_1^0(\theta,\varphi)$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{L}_- Y_1^1(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_- Y_1^1(\theta,\varphi) = -\hbar \, e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] e^{i\varphi}\operatorname{sen}\theta \sqrt{\frac{3}{8\pi}}$$

$$\hat{L}_- Y_1^1(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \, \hbar \cos\theta$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

Haciendo esto mismo $\hat{L}_- Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{2}\,\hbar \, Y_1^{-1}(\theta,\varphi)$

Pueden sacar $Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \, e^{-i\varphi} \operatorname{sen}\theta$ (tarea).

Resultado del ejercicio 54

$$\hat{L}_y |\text{autoestado } y\rangle = \hbar \cdot 1$$

$$|1,1\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle - i|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle\right)$$

$$\langle\hat{n}|1,1\rangle_y = \gamma_1^1(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^1(\theta,\varphi) - i\,Y_1^0(\theta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^{-1}(\theta,\varphi)\right)$$

$$\hat{L}_y \, \gamma_1^1(\theta,\varphi) = \hbar \, \gamma_1^1(\theta,\varphi) \qquad \hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Ejercicio 60

60 La función de onda de una partícula sujeta a un potencial esféricamente simétrico $V(r)$ está dada por:

$$\Psi(x) = (x + y + 3\,z)\,f(r)\,.$$

(a) ¿Es Ψ autofunción de L^2? Si es así, ¿cuál es el valor de l? Si no es así, ¿cuáles son los posibles valores de l que pueden ser obtenidos cuando se mide L^2 ?

potencial central $\Rightarrow$ $\psi(\bar{x}) = [\text{parte radial}] \cdot [\text{parte angular}]$

$= \tilde{f}(r) \cdot g(\theta,\varphi)$

¿cuando va a ser $\psi(\bar{x})$ autoestado de $\hat{L}^2$?

si $\left[\hat{L}^2 \psi(\bar{x}) = \hat{L}^2 \tilde{f}(r)\, g(\theta,\varphi) \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{L}^2 \text{ solo angular}}}{=} \tilde{f}(r)\, \hat{L}^2 g(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\, \psi(\bar{x})\right]$

podemos escribir $\hat{L}^2$ en su representación espacial y calcular $\hat{L}^2 \psi(\vec{x})$ pero es más fácil y rápido desarrollar $g(\theta,\varphi)$ en términos de los armónicos esféricos

¿cuando va a ser $\psi(\bar{x})$ autoestado de $\hat{L}^2$?

por ejemplo si

- $g(\theta,\varphi) \propto Y_1^1(\theta,\varphi) + Y_1^{-1}(\theta,\varphi)$ ✓ $l=1$

- $g(\theta,\varphi) \propto Y_1^1(\theta,\varphi) + Y_3^1(\theta,\varphi)$ ✗ $l=1$ $l=3$

queremos reescribir $\psi(\vec{x})$ en función de armónicos esféricos

$x = r\cos\varphi\,\text{sen}\,\theta$

$y = r\,\text{sen}\,\varphi\,\text{sen}\,\theta$

$z = r\cos\theta$

hacemos el más fácil

$Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \Rightarrow z = r\cdot\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0(\theta,\varphi)$

$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{i\varphi}\,\text{sen}\,\theta = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\cos\varphi + i\,\text{sen}\,\varphi)\,\text{sen}\,\theta$

$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$

$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{-i\varphi}\,\text{sen}\,\theta = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\cos\varphi - i\,\text{sen}\,\varphi)\,\text{sen}\,\theta$

Entonces x e y en términos de los armónicos esféricos quedan

$x = r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_1^{-1}(\theta,\varphi) - Y_1^1(\theta,\varphi)\right]$

$y = ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[-Y_1^1(\theta,\varphi) - Y_1^{-1}(\theta,\varphi)\right]$

$z = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0(\theta,\varphi)$

$\psi(\vec{x}) = (x + y + 3z)\,f(r)$

$$\psi(\vec{x}) = r\left[\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}(\theta,\varphi) - Y_1^{1}(\theta,\varphi)\right) + i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(-Y_1^{1}(\theta,\varphi) - Y_1^{-1}(\theta,\varphi)\right) + 3\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^{0}(\theta,\varphi)\right] f(r) = g(\theta,\varphi)\,\tilde{f}(r)$$

entre corchetes está $g(\theta,\varphi)$

$x + y + 3z$

$$g(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)\,Y_1^1(\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-i+1)\,Y_1^{-1}(\theta,\varphi) + 3\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0(\theta,\varphi)$$

$$\tilde{f}(r) = r\,f(r)$$

¿es autoestado $\psi(\vec{x})$ $\hat{L}^2$? Sí, porque es combinación lineal de los $Y_1^m(\theta,\varphi)$

(b) ¿Cuáles son las probabilidades de hallar a la partícula en los distintos estados con m definido?

si medimos $\hat{L}_z$ sobre este sistema con $\psi(\vec{x})$

¿ $P(m) = |\langle 1, m | \psi\rangle|^2$?

$$P(m) = \frac{\int dr\, r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\varphi\; Y_1^{m\,*}(\theta,\varphi)\,\psi(\vec{x})}{\int dr\, r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\varphi\; \psi(\vec{x})}$$

pero no vamos a hacer esto, hacemos algo más fácil

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi\rangle$$
$$\psi(\vec{x}) = (\langle r| \otimes \langle \hat{n}|)(|\tilde{f}\rangle \otimes |g\rangle)$$
$$\psi(\vec{x}) = \langle r | \tilde{f}\rangle \langle \hat{n} | g\rangle$$
$$\psi(\vec{x}) = \tilde{f}(r)\cdot g(\theta,\varphi)$$

$|g\rangle \longleftrightarrow g(\theta,\varphi)$

lo que queremos es escribir $|g\rangle$ en términos de $\{|1,m\rangle\}$

$$g(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)\,Y_1^1(\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-i+1)\,Y_1^{-1}(\theta,\varphi) + 3\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0(\theta,\varphi)$$

$$|g\rangle \propto -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)\,|1,1\rangle + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-i+1)\,|1,-1\rangle + 3\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,|1,0\rangle \longleftarrow$$

renormalizando

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{22}}\left((1+i)\,|1,1\rangle + (1-i)\,|1,-1\rangle + 3\sqrt{2}\,|1,0\rangle\right)$$

$$P(m=1) = |\langle 1,1|g\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{22}}(1+i)\right|^2 = \frac{1}{11}$$

$$P(m=0) = \frac{9}{11}$$

$$P(m=-1) = \frac{1}{11}$$

(c) Suponga que se conoce de alguna manera que $\Psi(x)$ es una autofunción de energía con autovalor E. Indique cómo puede hallarse $V(r)$.

$$H\,\Psi(\vec{x}) = E\,\Psi(\vec{x})$$

$$H\Psi = -\hbar^2\nabla^2\Psi + V(r)\,\Psi = E\,\Psi$$

$$-\hbar^2\nabla^2 = \left[-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2\right]$$

$$H\,\Psi(\vec{x}) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi(\vec{x}) - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\vec{x}) + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2\Psi(\vec{x}) + V(r)\Psi(\vec{x}) = E\,\Psi(\vec{x})$$

del inciso a) sabemos que $\Psi(\vec{x})$ es autoestado de $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2\,\Psi(\vec{x}) \underset{\substack{\uparrow \\ \ell=1}}{=} \hbar^2\, 1\cdot(1+1)\,\Psi(\vec{x})$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi(\vec{x}) - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\vec{x}) + \frac{\hbar^2}{r^2}\,2\,\Psi(\vec{x}) + V(r)\Psi(\vec{x}) = E\,\Psi(\vec{x})$$

$$\Psi(\vec{x}) = \tilde{f}(r)\,g(\theta,\varphi)$$

$$\tilde{f}(r) = r\,f(r)$$

reemplazamos acá

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi(\vec{x}) - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\vec{x}) + \frac{\hbar^2}{r^2}\,2\,\Psi(\vec{x}) + V(r)\Psi(\vec{x}) = E\,\Psi(\vec{x})$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} r f(r)\cdot\cancel{g(\theta,\varphi)} - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} r f(r)\,\cancel{g(\theta,\varphi)} + \frac{2\hbar^2}{r^2}\, r f(r)\,\cancel{g(\theta,\varphi)} + \rightarrow$$

$$\rightarrow + V(r)\, r f(r)\,\cancel{g(\theta,\varphi)} = E\, r f(r)\,\cancel{g(\theta,\varphi)}$$

$$-\hbar^2\frac{d^2}{dr^2}\big(r f(r)\big) - \frac{2\hbar^2}{r}\frac{d}{dr}\big(r f(r)\big) + \frac{2\hbar^2}{r} f(r) + V(r)\, r f(r) = E\, r f(r)$$

$$\Rightarrow\quad V(r) = \frac{1}{r f(r)}\left[E\, r f(r) + \hbar^2\left(\frac{d^2}{dr^2}\big(r f(r)\big) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\big(r f(r)\big) + \frac{2}{r} f(r)\right)\right]$$