Problema 10. La función de onda de una partícula sujeta a un potencial esféricamente simétrico V(r) está dada por

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

con f(r) alguna función de $r=\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}$.

(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?

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

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

Solución

(a) Nos dicen que tenemos una función de onda sujeta a un potencial esféricamente simétrico escrita de la forma:

$$\Psi(x,y,z)=(x+y+3z)f(r), \qquad (1)$$

con $f(r)$ alguna función de $r=\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}$.

Como la función de onda (1) está sujeta a la influencia de un potencial esféricamente simétrico, podemos considerar que nuestro problema tiene simetría esférica. La función (1) está escrita en coordenadas cartesianas, vamos a resolver el problema trabajando con coordenadas esféricas haciendo la siguiente transformación de coordenadas:

$$\begin{Bmatrix} x=r\cos\phi\, sen\,\theta \\ y=rsen\,\phi\cos\theta \\ z=r\cos\theta \end{Bmatrix} \qquad (2)$$

Reemplazamos (2) en (1) y obtenemos la función de onda en esféricas:

$$\Psi(r,\theta,\phi)=(rcos\,\phi\, sen\,\theta+rsen\,\phi\, sen\,\theta+3\, sen\,\phi\cos\theta)f(r). \qquad (3)$$

Para verificar si ψ es autofunción de L^2 tenemos dos formas posibles:

i) Directamente operamos $\hat{L}^2$ sobre la función de onda (3).

Recordemos la expresión para el operador:

$$\hat{L}^2=-\hbar^2((\frac{\partial^2}{\partial^2\theta})+(\frac{1}{tg\,\theta}(\frac{\partial}{\partial\theta}))+\frac{1}{sen^2\theta}(\frac{\partial^2}{\partial^2\phi})). \quad (4)$$

$$\hat{L}^2\Psi=-\hbar^2 rf(r)(-sen\,\theta\cos\phi-sen\,\theta sen\,\phi-3\cos\theta-(1-\cos^2\theta)(\frac{sen\,\phi}{sen\,\theta})-3\cos\theta)=2\hbar^2\Psi$$

Verificamos que ψ es autofunción de $\hat{L}^2$, con autovalor $2\hbar^2$ y $l=1$.

ii) Expresamos la función de onda (3) como una sumatoria de armónicos esféricos conveniente y verificamos si es autofunción de $\hat{L}^2$.

$$Y_1 1=-\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}e^{i\phi}sen\,\theta=-\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}[\cos\phi+isen\,\phi]\,sen\,\theta. \quad (5)$$

$$Y_1^0=\sqrt{(\frac{3}{4\pi})}\cos\theta. \quad (6)$$

$$Y_1^{-1}=\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}e^{-i\phi}sen\,\theta=\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}[\cos\phi-i\,sen\,\phi]\,sen\,\theta. \quad (7)$$

A partir de (5),(6) y (7) veamos algunas relaciones útiles para poder reemplazar en la función de onda (3):

$$Y_1^{-1}-Y_1^1=2\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}sen\,\theta\cos\phi. \quad (8)$$

$$Y_1^1+Y_1^{-1}=-2i\sqrt{(\frac{3}{8\pi})}sen\,\theta sen\,\phi. \quad (9)$$

$$3\cos\theta=\sqrt{(12\pi)}Y_1^0. \quad (10)$$

Ahora sí, ya podemos expresar (3) como suma de armónicos esféricos de la siguiente forma:

$$\Psi(r,\theta,\phi)=rf(r)[\sqrt{(\frac{8\pi}{3})}(\frac{Y_1^{-1}-Y_1^1}{2})-\sqrt{(\frac{8\pi}{3})}(\frac{Y_1^1-Y_1^{-1}}{2i})+\sqrt{(12\pi)}Y_1^0]. \quad (11)$$

En (11) si llamamos $R(r)=rf(r)$ nos queda finalmente la expresión para ψ:

$$\Psi(r,\theta,\phi)=R(r)\sqrt{(\frac{2\pi}{3})}[(1+i)Y_1^{-1}+(-1+i)Y_1^1+\sqrt{(2)}Y_1^0]. \quad (12)$$

Veamos los autoestados de $\hat{L}^2$, aplicando el operador $\hat{L}^2$ sobre cada término en (12).

$$\hat{L}^2\Psi = L^2(R(r)\sqrt{(\frac{2\pi}{3})}[(1+i)Y_1^{-1}+(-1+i)Y_1^1+\sqrt{(2)}Y_1^0]).$$

Distribuyendo en cada término obtenemos:

$$\hat{L}^2\Psi = (R(r)\sqrt{(\frac{2\pi}{3})}[2\hbar^2(1+i)Y_1^{-1}+2\hbar^2(-1+i)Y_1^1+2\hbar^2 3\sqrt{2}Y_1^0]) = 2\hbar^2\Psi. \qquad (13)$$

Los armónicos esféricos son autoestados de $\hat{L}^2$ con autovalor $l(l+1)\hbar^2$. Luego, por (13) la función de onda es autoestado de $\hat{L}^2$ con autovalor $2\hbar^2$, con $l=1$.

<u>*Nota*</u>: normalizamos la función de onda (12) por que cada término que acompaña a los armónicos esféricos que resultan ortonormales.

$$\Psi(r,\theta,\phi) = (R(r)\sqrt{(\frac{3}{44\pi})}[\sqrt{(\frac{2\pi}{3})}(1+i)|1-1\rangle+\sqrt{(\frac{2\pi}{3})}(-1+i)|11\rangle+\sqrt{(12\pi)}|10\rangle]). \qquad (14)$$

(b) Probabilidades para los estados con m = -1,0,1:

$$P_{m=0} = |Y_1^0|\Psi_{m=0}(r,\theta,\phi)|^2 = |\langle 10|\Psi(r,\theta,\phi)\rangle|^2 = \frac{9}{11}.$$

$$P_{m=1} = |Y_1^1|\Psi_{m=1}(r,\theta,\phi)|^2 = |\langle 11|\Psi(r,\theta,\phi)\rangle|^2 = \frac{1}{11}.$$

$$P_{m=0} = |Y_1^{-1}|\Psi_{m=-1}(r,\theta,\phi)|^2 = |\langle 1-1|\Psi(r,\theta,\phi)\rangle|^2 = \frac{1}{11}.$$

(c) Nos dan el dato de la energía E del sistema. No dicen que es autoestado de la energía del sistema, entonces trabajamos con el hamiltoniano de nuestro sistema: $\hat{H} = (\frac{\hat{p}^2}{2m})+V(r)$.

$$\hat{H}\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi).$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[(\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2})+(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r})-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2\Psi]+V(r)\Psi = E\Psi.$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[(\frac{\partial^2(rf(r))}{\partial r^2})+(\frac{1}{r}\frac{\partial(rf(r))}{\partial r})-\frac{2}{r}f(r)]+V(r)rf(r) = Erf(r). \qquad (16)$$

Despejamos en (16) para hallar V(r).