FT2 1c2024 Guía 7: Problemas 9 y 10

Juan Laurnagaray (P9) y Franco Mayo(P10)

May 23, 2024

1 Problema 9

El ejercicio nos propone encontrar la probabilidad de obtener $m\hbar$ siendo el estado una rotación en ángulo β alrededor del eje \hat{e}_y de $|2,0\rangle$, es decir, queremos calcular

$$P(J_z = m\hbar) = |\langle 2, m| U[R_{\hat{e}_n}(\alpha)] | 2, 0 \rangle|^2, \tag{1}$$

con $m = 0, \pm 1, \pm 2$.

Para esto empecemos por hacer un repaso de la representación del operador de rotación¹. Habíamos visto que una rotación se puede escribir como

$$U_{\hat{e}_n}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \mathbf{J} \cdot \hat{e}_n}, \qquad (2)$$

donde **J** es el vector momento angular cuyas componentes satisfacen las relaciones de conmutación $[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k$, \hat{e}_n es la dirección alrededor de la cual rotamos y α es el ángulo en el que rotamos. En general una rotación arbitraria se puede escribir como el producto de tres rotaciones sucesivas alrededor de tres ejes diferentes como repasamos en el ejercicio 4. Estamos interesados en como actúa una rotación R sobre un estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle_R = U[R] |\psi\rangle . \tag{3}$$

Vamos a ver como calcular la forma explícita del operador de rotación U[R] en términos de la base $|j,m\rangle$. Sabemos que como U[R] está generada por $\bf J$ entonces conmuta con $\bf J^2$, i.e. $[U[R], \bf J^2] = 0$ y por lo tanto aplicar una rotación sobre el estado $|j,m\rangle$ no nos saca del subespacio que estos spanean, es decir, se tiene que

$$\langle j', m' | U[R] | j, m \rangle \sim \delta_{j'j}$$
. (4)

Entonces el operador U[R] va a estar representado por una matriz de dimensión $(2j + 1) \times (2j + 1)$ que denominamos $D^{(j)}[R]$ y cuyos elementos de matriz vienen dados por

$$D_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | U[R] | j, m \rangle . \tag{5}$$

¹Para esto seguimos principalmente el capítulo 10 y algo del capítulo 8 de [1]. También un poco de [2].

Mediante dos rotaciones podemos llevar el un vector que inicialmente se encuentra alineado con el eje z hacia la dirección de \hat{e}_n descripto por los ángulos de esféricas

$$\hat{e}_x = \cos\varphi\sin\theta, \qquad \hat{e}_y = \sin\varphi\sin\theta, \qquad \hat{e}_z = \cos\theta,$$
 (6)

mediante las dos transformaciones sucesivas²

$$R(\theta, \varphi) = R_{\hat{e}_z}(\varphi) R_{\hat{e}_y}(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta J_y}.$$
 (7)

Luego los elementos en la base $|j, m\rangle$

$$D_{m'm}^{(j)}[R(\theta,\varphi)] = \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta J_y} | j, m \rangle$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}m'\varphi} d_{m'm}^{(j)}(\theta) , \qquad (8)$$

donde definimos

$$d_{m'm}^{(j)}(\theta) = \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar}\theta J_y} | j, m \rangle . \tag{9}$$

Con estos resultados en mano vamos a ver ahora que, en el caso de spin entero $j=\ell$, existe una relación entre las matrices de rotación y los armónicos esféricos. Consideremos para esto un estado rotado

$$|\ell, m\rangle_{R} = U[R] |\ell, m\rangle$$

$$= \sum_{m'} |\ell, m'\rangle\langle\ell, m'| U[R] |\ell, m\rangle$$

$$= \sum_{m'} D_{m'm}^{(\ell)}[R] |\ell, m'\rangle . \tag{10}$$

Para relacionarlo con los armónicos esféricos necesitamos representarlo en base de coordenadas, considerando entonces el autoestado $|\hat{e}_r\rangle$ del operador de posición sabemos que

$$\langle \hat{e}_r | \ell, m \rangle = Y_\ell^m(\theta, \varphi) \equiv Y_\ell^m(\hat{e}_r) ,$$
 (11)

donde

$$\hat{e}_r = \sin\theta\cos\varphi \hat{e}_x + \sin\theta\sin\varphi \hat{e}_y + \cos\theta\hat{e}_z$$
.

Este autoestado de posición podemos obtenerlo a partir de una rotación desde el eje \hat{e}_z

$$\begin{aligned} |\hat{e}_r\rangle &= U[R(\theta,\varphi)] |\hat{e}_z\rangle \\ &= \sum_{\ell',m'} U[R(\theta,\varphi)] |\ell',m'\rangle \langle \ell',m'|\hat{e}_z\rangle \end{aligned}$$

²Recordemos que en general dos rotaciones no conmutan, por lo tanto es importante ser cuidadoso con el orden en que se realizan las transformaciones.

donde

$$\langle \ell', m' | \hat{e}_z \rangle = Y_{\ell'}^{m'} (\hat{e}_z)^* = Y_{\ell'}^{m'} (0, 0)^* = \delta_{m'0} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}},$$

y por lo tanto usando $\langle \ell, m | \hat{e}_r \rangle = Y_\ell^m(\theta, \varphi)^*$ tenemos

$$Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi)^{*} = \sum_{\ell',m'} \langle \ell, m | U[R(\theta,\varphi)] | \ell', m' \rangle \, \delta_{m'0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}$$
$$= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} e^{-im\varphi} d_{m,0}^{(\ell)}(\theta) ,$$

donde concluimos la relación

$$d_{m,0}^{(\ell)}(\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} e^{im\varphi} Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi)^{*}.$$
(12)

Con esto ya tenemos los ingredientes para calcular las probabilidades que nos pide el problema

$$P(J_z = m\hbar) = |\langle 2, m|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}|2, 0\rangle|^2$$
$$= |d_{m,0}^{(2)}(\beta)|^2$$
$$= \frac{4\pi}{5} |Y_2^m(\beta, \varphi)|^2.$$

Yendo a la tabla de Clebsch-Gordan encontramos

$$P(J_z = \pm 2\hbar) = \frac{3}{8}\sin^4\beta$$

$$P(J_z = \pm\hbar) = \frac{3}{2}\cos^2\beta\sin^2\beta \quad ,$$

$$P(J_z = 0) = \left(\frac{3}{2}\cos^2\beta - \frac{1}{2}\right)$$
(13)

donde usamos la propiedad de los armónicos esféricos $Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$.

2 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 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

- 1. ¿Es Ψ autofunción de L^2 ? Su es así, ¿cuál es el valore de l? Si no es así, ¿cuáles son los posibles valores de l que pueden ser obtenidos cuando se mide L^2 ?
- 2. ¿Cuáles son las probabilidades de hallar a la partícula en los distintos estados con m definido?
- 3. 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)
- a) Para comenzar a resolver el problema debemos notar que la función de onda $\Psi(x,y,z)$ nos viene dada en coordenadas que resultan incómodas para obtener información sobre el momento angular del sistema. Tenemos dos opciones para solucionar esto, la primera (y más cuentosa) es transformando a coordenadas polares y aplicando el operador L^2 en dicha representación,

$$L^{2} = -\hbar^{2} \left(\frac{\partial^{2}}{\partial \theta^{2}} = \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^{2} \theta} \frac{\partial^{2}}{\partial \phi^{2}} \right).$$

La segunda opción es más simple y consiste en que nosotros ya conocemos las autofunciones de L^2 y L_z , los armónicos esféricos. Vamos a reescribir $\Psi(x, y, z)$ en función de armónicos esféricos Y_l^m . Para esto utilizamos que:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \; ; \; Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x+iy}{r} \; ; \; Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x-iy}{r}.$$

La función de onda reescrita en armónicos esféricos es entonces:

$$\Psi(x,y,z) = rf(r)\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left[(1+i)Y_1^{-1} + (-1+i)Y_1^1 + 3\sqrt{2}Y_1^0 \right].$$
 (14)

Sabemos que los armónicos esféricos Y_l^m son autoestados de L^2 con autovalor $\hbar(l(l+1))$. En la eq. (14) vemos que todos los armónicos esféricos que aparecen tienen l=1, por lo tanto este estado es autoestado de L^2 con l=1, va que:

$$L^2\Psi(\vec{r}) = rf(r)\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[(1+i)2\hbar^2.Y_1^{-1} + 2\hbar^2(-1+i)Y_1^1 + 2\hbar^23\sqrt{2}Y_1^0\right] = 2\hbar^2\Psi(\vec{r}) = \hbar^21(1+1)\Psi(\vec{r}).$$

Con esto damos por concluído el item a.

b) En este punto se nos pide calcular las probabilidades de hallar a la partícula en los distintos estados con m definido. Para esto vamos a tomar la función de onda eq. (14) y la llevaremos a la forma de ket, así podremos fácilmente obtener las distintas probabilidades. Para esto utilizaremos que los armónicos esféricos se conectan con los autoestados de momento angular $|l,m\rangle$ de la siguiente forma:

$$|1,1\rangle \sim Y_1^1 \; ; \; |1,0\rangle \sim Y_1^0 \; ; \; |1,-1\rangle \sim Y_1^{-1}.$$

Nótese que hablamos de proporcionalidad y no de igualdad ya que falta normalizar a los armónicos esféricos. El estado del sistema es entonces:

$$|\Psi\rangle = |R(r)\rangle \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \mathcal{N} \left[(1+i)|1,-1\rangle + (-1+i)|1,1\rangle + 3\sqrt{2}|1,0\rangle \right].$$

Donde $|R(r)\rangle$ es la parte radial del estado, y \mathcal{N} es una constante de normalización que debemos determinar. Una vez normalizado el estado obtenemos:

$$|\Psi\rangle = |R(r)\rangle \frac{1}{\sqrt{22}} \left[(1+i)|1, -1\rangle + (-1+i)|1, 1\rangle + 3\sqrt{2}|1, 0\rangle \right].$$
 (15)

Teniendo el estado, procedemos a calcular las probabilidades utilizando la regla de Born.

$$P(m=1) = |\langle 1, 1 | \Psi \rangle|^2 = \frac{1}{11}$$

$$P(m=-1) = |\langle 1, -1 | \Psi \rangle|^2 = \frac{1}{11}$$

$$P(m=0) = |\langle 1, 0 | \Psi \rangle|^2 = \frac{9}{11}$$

c) Nos dicen que $\Psi(R)$ es autofunción del hamiltoniano, con autovalor E. A partir de esto tenemos que ver cómo se puede obtener la forma funcional de V(r). Para esto escribimos la ecuación de Schrödinger:

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

ya que el potencial es radial, es natural trabajar en coordenadas esféricas, por lo que vamos a escribir el laplaciano como

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \underbrace{\frac{1}{r^2 sin\theta}}_{} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

por lo tanto la ecuación de Schrödinfer es

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

Ahora utilizamos que $\Psi(\vec{r})$ es separable en partes radial y angular, y que la aprte angular es autoestado de L^2 con autovalor l=1, por lo que finalmente llegamos a la expresión:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{2}{r^2} \right] r f(r) + V(r) r f(r) = Er f(r). \tag{16}$$

De este modo llegamos a una ecuación radial, de la cual conociendo f(r) podemos despejar V(r), aunque el ejercicio termina en este momento ya que no nos pide que la calculemos explícitamente.

References

- [1] Michel Le Bellac. Quantum Physics. Cambridge University Press, 2006.
- [2] Jun John Sakurai. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Addison-Wesley, Reading, MA, 1994. URL: https://cds.cern.ch/record/1167961.