

Práctica 4

Los ejercicios marcados con asterisco (*) son opcionales.

Los ejercicios marcados con una daga (†) están relacionados con la cátedra Experimentos Cuánticos I (DF-FCEX-UNLP). Son particularmente recomendados para quienes cursen, hayan cursado o vayan a cursar dicha materia.

4.1	Momento angular orbital	1
4.2	Potencial central - propiedades	2
4.3	Potencial central - ejemplos	4
4.4	El átomo de hidrógeno	6

4.1 Momento angular orbital

56. Se define el operador *momento angular orbital* mediante su análogo clásico:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

En componentes:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

- Resumir las expresiones para las tres componentes del operador momento angular utilizando el símbolo de Levi-Civita.
- Probar $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$.
- Si $\hat{L}^2 := \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$, probar que $\forall i = 1, 2, 3$ vale $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$.
- Se definen los *operadores escalera de momento angular* como $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$. Probar:

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{L}_{\pm}, \quad \hat{L}_{\pm}^{\dagger} = \hat{L}_{\mp}.$$

- Escribir \hat{L}^2 en términos de \hat{L}_+ , \hat{L}_- y \hat{L}_z .

57.* a. Escribiendo a los operadores \hat{x} y \hat{p} en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) , probar

$$\frac{\hat{L}_z}{\hbar} = -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

b. Escribiendo al operador laplaciano en coordenadas esféricas, probar

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}.$$

58. Sean $|l, m\rangle$, con $l, m \in \mathbb{N}_0$ y $-l \leq m \leq l$, los autoestados de los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z :

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

Dichos autoestados son ortonormales: $\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$. Se sabe que, en la representación de coordenadas esféricas, estos estados corresponden a los armónicos esféricos (ver práctica adicional). Es decir: $\langle \theta \phi | l m \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi)$.

a. Probar, usando los resultados del inciso 56d:

$$\hat{L}_z (\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle) = \hbar (m \pm 1) (\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle), \quad \hat{L}^2 (\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle) = \hbar^2 l(l+1) (\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle).$$

Observación: estas relaciones implican $\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle \propto |l, m \pm 1\rangle$, y justifican la interpretación de los operadores \hat{L}_{\pm} como operadores de creación y destrucción de modos del número cuántico m .

b. Probar, utilizando el resultado del inciso 56e, las relaciones

$$\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l \pm m + 1)(l \mp m)} |l, m \pm 1\rangle.$$

4.2 Potencial central - propiedades

59. En 3 dimensiones, considerar un hamiltoniano \hat{H} con potencial central $V(r)$, es decir, que el potencial no depende de los ángulos θ y ϕ . Entonces

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)$$

(Se ha denominado μ a la masa para no confundirla con el número cuántico m).

a. Utilizando los resultados del problema 57, probar

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0.$$

Observación: si a estas relaciones de conmutación le sumamos la relación $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$, que ya fue probada en el inciso 56c, resulta que tanto las energías (es decir, los autovalores de \hat{H}) como los números cuánticos l y m son todos medibles simultáneamente en un problema con potencial central.

- b. Dada la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$, probar que la sustitución $\Psi(r, \theta, \phi) = r^{-1}\chi(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ (donde $Y_{lm}(\theta, \phi)$ es un armónico esférico, que satisface $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$) conduce a la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) \right] \chi(r) = E\chi(r).$$

Sugerencia: usar el resultado del inciso 57b.

Observación 1: este resultado muestra que, para un potencial central, se puede reducir el problema de calcular la parte radial de la función de onda a una ecuación de Schrödinger unidimensional (en el dominio $r \in \mathbb{R}^+$) con un *potencial efectivo*

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r).$$

Observación 2: al resolver la anterior ecuación diferencial, se espera obtener un nuevo número cuántico que se denominará n . Como el número cuántico l también aparece en la ecuación diferencial, resulta así que las energías podrán depender, en un problema general, de los dos números cuánticos n y l . Notar que, sorprendentemente, no dependen del número cuántico m .

- c. ¿Qué condiciones de contorno debe satisfacer $\chi(r)$ en $r \rightarrow 0$ y en $r \rightarrow \infty$?
- d. Se sabe (ver Práctica adicional) que los armónicos esféricos son ortonormales según la relación

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Usar este resultado junto con la relación $\int d^3x |\Psi|^2 = 1$ para probar

$$\int_0^\infty dr |\chi(r)|^2 = 1.$$

Observación: esto permite identificar a $|\chi(r)|^2$ como una *densidad radial de probabilidad*.

60.† La *aproximación dipolar eléctrica* (o simplemente *aproximación dipolar* o *modelo dipolar*) establece que sólo son posibles las transiciones entre niveles de energía tales que el valor de expectación $\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle$ sea distinto de cero, donde $\mathbf{d} \propto \mathbf{x}$ es el momento dipolar eléctrico. En pocas palabras, dado un estado inicial $|n, l, m\rangle$ y un estado final $|n', l', m'\rangle$, la aproximación dipolar establece que debe cumplirse $\langle n', l', m' | \hat{\mathbf{x}} | n, l, m \rangle \neq 0$. Aquí n es un número cuántico que surge de haber resuelto la ecuación de Schrödinger radial para algún dado potencial central.

Escribiendo al vector posición \mathbf{x} en coordenadas radiales, probar que en este modelo sólo son posibles transiciones donde se cumple

$$\Delta l \in \{-1, +1\}, \quad \Delta m \in \{-1, 0, +1\}, \quad (9)$$

donde se ha definido $\Delta l := l' - l$ y $\Delta m := m' - m$.

Sugerencia: escribir a la transición $\langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle$ como una integral respecto a r , θ y ϕ . Desconsiderar a la integral radial, pues se está estudiando lo que ocurre sin un potencial central en concreto. Luego, emplear la ortogonalidad de los polinomios asociados de Legendre junto con las siguientes identidades:

$$\begin{aligned}\sqrt{1-u^2}P_l^m(u) &= \frac{-1}{2l+1} \left[P_{l+1}^{m+1}(u) - P_{l-1}^{m+1}(u) \right], \\ \sqrt{1-u^2}P_l^m(u) &= \frac{1}{2l+1} \left[(l-m+1)(l-m+2)P_{l+1}^{m-1}(u) - (l+m-1)(l+m)P_{l-1}^{m-1}(u) \right], \\ uP_l^m(u) &= \frac{1}{2l+1} \left[(l-m+1)P_{l+1}^m(u) + (l+m)P_{l-1}^m(u) \right].\end{aligned}$$

Nota: a las ecuaciones (9) se las conoce como *reglas de selección*.

4.3 Potencial central - ejemplos

61. Considerar una partícula restringida a moverse en un anillo de radio $R > 0$ en ausencia de otras interacciones (modelo simplificado de un *rotador*).

- Calcular las energías y las autofunciones de onda.
Sugerencia: escribir al hamiltoniano en términos de las componentes del momento angular.
- En este caso, ¿cuál es la causa de la cuantización de la energía?
- ¿Cuál es el mínimo valor que pueden tomar el número cuántico y la energía?
¿Cuál es la degeneración de cada nivel?
- ¿Por qué este estado fundamental difiere del correspondiente a una partícula en una caja unidimensional de la misma longitud?

62.† Considerar una partícula restringida a moverse en una esfera de radio $R > 0$ en ausencia de otras interacciones.

- Calcular las energías y las autofunciones de onda.
Sugerencia: escribir al hamiltoniano en términos de las componentes del momento angular.
- Probar que los autovalores del momento angular cuadrático \hat{L}^2 son invariantes ante el cambio $l \rightarrow -l - 1$.

Observación: llevando esta invarianza a la ecuación asociada de Legendre, pueden definirse los polinomios asociados de Legendre para índice l negativo según

$$P_{-l}^m(u) := P_{l-1}^m(u),$$

lo cual lleva a poder definir los armónicos esféricos con l negativo.

- Teniendo en cuenta la posibilidad de tener un índice l negativo, ¿Cuál es el mínimo valor que puede tomar la energía? ¿Cuál es la degeneración de cada nivel?

63. Considerar un oscilador armónico isotrópico en 3 dimensiones, de modo que su potencial puede ser escrito como

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 .$$

- a. Escribir la ecuación de Schrödinger para la coordenada radial r . Luego adimensionalizarla para obtener la expresión

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + \frac{l(l+1)}{q^2} + q^2 \right) \chi = 2\epsilon \chi .$$

- b. Verificar que la solución para grandes valores de q es $\chi(q) \sim e^{-q^2/2}$, y para pequeños valores de q es $\chi(q) \sim q^{l+1}$. ¿Cuál es el mínimo valor que puede tomar el entero l ?
- c. Teniendo en cuenta los resultados asintóticos del inciso anterior, proponer una solución de la forma

$$\chi(q) = q^{l+1} e^{-q^2/2} K(q)$$

y verificar que la función $K(q)$ satisface la ecuación diferencial

$$\left[-\frac{d^2}{dq^2} - 2\left(\frac{l+1}{q} - q\right)\frac{d}{dq} + (2l+3) \right] K(q) = 2\epsilon K(q) .$$

- d. Verificar que el anterior operador diferencial es invariante ante la sustitución $q \rightarrow -q$. Entonces es razonable proponer una solución que sea par en la variable q . Proponiendo entonces la sustitución $z = q^2$ y una solución de la forma $K(q) = L(q^2) = L(z)$, verificar que la función $L(z)$ satisface la ecuación diferencial

$$\left[-4z\frac{d^2}{dz^2} - 2(2l+3-2z)\frac{d}{dz} + (2l+3-2\epsilon) \right] L(z) = 0 .$$

- e. Identificar la anterior ecuación diferencial con la ecuación asociada de Laguerre

$$\left(x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n \right) L_n^{(\alpha)}(x) = 0 , \quad n \in \mathbb{N}_0 .$$

¿Quiénes son α y n en términos de l y ϵ ?

- f. Recuperando las unidades, probar que las autofunciones están dadas por

$$\Psi(r, \theta, \phi) = N_{nlm} r^l e^{-\mu\omega r^2/2\hbar} L_n^{(l+1/2)}(\mu\omega r^2/\hbar) ,$$

donde N_{nlm} es una constante de normalización. Asimismo, probar que las energías están dadas por

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) .$$

- g. ¿Cuál es la degeneración de cada nivel de energía? Comparar con el problema 54.b.

4.4 El átomo de hidrógeno

64. Considerar un átomo hidrogenoide, es decir, un átomo formado por un único electrón (carga $-e$) y por Z protones en el núcleo (carga $+Ze$; el caso $Z = 1$ corresponde al átomo de hidrógeno). Entonces la energía potencial coulombiana que experimenta el electrón debido al núcleo es

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

- a. Escribir la ecuación de Schrödinger radial y adimensionalizarla, obteniendo

$$\left\{ -\frac{d^2}{dq^2} + \frac{l(l+1)}{q^2} - \frac{2}{q} \right\} \chi = -k^2 \chi, \quad \text{donde } k^2 = -\frac{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}{\mu Z^2 e^4} E.$$

Nota: aquí μ es la masa reducida entre el electrón y el núcleo.

- b. A partir de ahora, considerar exclusivamente el caso de estados ligados ($E < 0$). Verificar que la solución para grandes valores de q es $\chi(q) \sim e^{-kq}$, y para pequeños valores de q es $\chi(q) \sim q^{l+1}$. ¿Cuál es el mínimo valor que puede tomar el entero l ?
- c. Teniendo en cuenta los resultados asintóticos del inciso anterior, proponer una solución de la forma

$$\chi(q) = q^{l+1} e^{-kq} K(q)$$

y verificar que la función $K(q)$ satisface la ecuación diferencial

$$\left[-q \frac{d^2}{dq^2} - 2 \left(l + 1 - kq \right) \frac{d}{dq} + 2k(l+1) - 2 \right] K(q) = 0.$$

- d. Proponiendo la sustitución $z = 2kq$ y $K(q) = L(z) = L(2kq)$, identificar la anterior ecuación diferencial con la ecuación asociada de Laguerre

$$\left(x \frac{d^2}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx} + \tilde{n} \right) L_{\tilde{n}}^{(\alpha)}(x) = 0, \quad \tilde{n} \in \mathbb{N}_0,$$

donde $\alpha = 2l + 1$ y $\tilde{n} = k^{-1} - l - 1$.

- e. Notar que k^{-1} ha quedado igual a $\tilde{n} + l + 1$, lo cual siempre es igual a un número entero mayor o igual a 1. Entonces, definiendo el número cuántico $n = \tilde{n} + l + 1 \in \mathbb{N}$, verificar que las energías son

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Observación: notar que este resultado, escrito de esta forma, depende de un único número cuántico n y es independiente del número cuántico l .

65. ¿En qué se diferencian las energías de los estados ligados del átomo de hidrógeno normal ${}^1\text{H}$ y del átomo de deuterio ${}^2\text{H}$ (isótopo del hidrógeno)? ¿Y en qué se diferencian las energías de los estados ligados del átomo de hidrógeno normal ${}^1\text{H}$ y el átomo de helio ionizado ${}^4\text{He}^+$?

66. Considerar a un electrón en un átomo hidrogenoide, que se encuentra en su estado fundamental $(n, l, m) = (1, 0, 0)$. La correspondiente función de onda es independiente de los ángulos:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu Z e^2}.$$

- Hallar la distancia más probable y la distancia promedio de dicho electrón al núcleo.
- Hallar los valores medios de la energía cinética $\langle \hat{E}_{\text{cin}} \rangle$ y de la energía potencial $\langle \hat{V} \rangle$. Verificar que $\langle \hat{E}_{\text{cin}} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle = -E_1$.

Nota: es posible probar que se cumple $\langle \hat{E}_{\text{cin}} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle = -E_n \quad \forall n \in \mathbb{N}$.