

Unidad 3: Momento Angular, Rotaciones y Rotadores Rígidos

Juan Montoya

13 de agosto de 2025

Resumen de conceptos clave

- **Operadores de momento angular:** Los componentes J_x, J_y, J_z cumplen $[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$ y $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ conmuta con cada J_i . Los autoestados simultáneos de \mathbf{J}^2 y J_z se denotan $|j, m\rangle$, con autovalores $\hbar^2 j(j+1)$ y $\hbar m$ ($m = -j, \dots, j$).
- **Rotador rígido simétrico:** Para un tope simétrico con momentos de inercia $I_\perp = I_1 = I_2$ e I_3 , el Hamiltoniano puede escribirse $H = \frac{\mathbf{J}^2}{2I_\perp} + \left(\frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I_\perp}\right) J_3^2$. Los autoestados pueden elegirse comunes a \mathbf{J}^2 y J_3 (eje intrínseco), y presentan degeneraciones características. En el caso esférico ($I_\perp = I_3$) los niveles dependen solo de j y tienen degeneración $(2j+1)$.
- **Generadores de rotaciones:** En 3D, una rotación finita $R_{\mathbf{u}}(\theta)$ es generada por los operadores L_i (clásico) o J_i (cuántico). Para una rotación infinitesimal, $\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r} + \theta \mathbf{u} \times \mathbf{r}$, y en cuántica $U(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \mathbf{u} \cdot \mathbf{J}}$.
- **Operadores unitarios y transformaciones:** Dado un observable A y $U(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha A}$, la transformación de un operador X es $\tilde{X} = UXU^\dagger$. Los conmutadores $[A, J_\pm]$ controlan cómo se transforman los operadores de escalera $J_\pm = J_x \pm iJ_y$.
- **Relaciones de incertidumbre para \mathbf{J} :** Se verifica $\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_z \rangle|$ y sus permutaciones cíclicas. Estados de mínima suma de varianzas pueden caracterizarse con condiciones sobre J_\pm .
- **Estados cuasi-clásicos y límite clásico:** Para $j \gg 1$ y estados apropiados, las distribuciones de m se aguzan alrededor del valor más probable y se recupera el comportamiento clásico (p.ej., precesión y dispersión angular pequeña).
- **Oscilador 3D y momento angular:** En productos de estados cuasi-clásicos 1D, los promedios y varianzas de $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ se pueden ajustar para saturar cotas de incertidumbre y la distribución de resultados de L^2 puede ser de tipo Poisson.

Ejercicios y ejemplos transcritos

Ejercicio 4. Rotador rígido simétrico

Considera una molécula formada por átomos no alineados cuyas distancias relativas se suponen invariantes (rotador rígido). \mathbf{J} es la suma de los momentos angulares de los átomos con respecto al centro de masa de la molécula, situado en un punto fijo; los ejes constituyen un triedro ortonormal fijo. Los tres ejes principales de inercia del sistema se denotan por 1, 2, 3, suponiendo que el elipsoide de inercia es un elipsoide de revolución alrededor de 3 (rotador simétrico).

La energía rotacional de la molécula es

$$H = \frac{1}{2I_1} J_1^2 + \frac{1}{2I_2} J_2^2 + \frac{1}{2I_3} J_3^2,$$

siendo J_i las componentes de \mathbf{J} sobre los versores \mathbf{w}_i de los ejes móviles 1, 2, 3 ligados a la molécula, e I_i los momentos de inercia correspondientes. Se tiene además

$$J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = \mathbf{J}^2.$$

1. Deriva las relaciones de conmutación de J_1, J_2, J_3 a partir de los resultados estándar para \mathbf{J} .
2. Introducimos los operadores $J'_i = J \cdot \mathbf{w}_i$. Usando los argumentos generales del Capítulo VI, muestra que existen autovectores comunes a \mathbf{J}^2 y J'_3 con autovalores $\hbar^2 j(j+1)$ y $\hbar k$, con $k = -j, \dots, j$.
3. Expresa el Hamiltoniano del rotador en términos de \mathbf{J}^2 y $J_3'^2$. Encuentra sus autovalores.
4. Muestra que pueden hallarse autoestados comunes de \mathbf{J}^2 , J_z y J'_3 , a denotarse $|j, m, k\rangle$ [con autovalores $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar m$, $\hbar k$]. Prueba que estos estados también son autoestados de H .
5. Calcula los conmutadores de $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ y K_\pm con \mathbf{J}^2 , J_z , J'_3 . Deduce su acción sobre $|j, m, k\rangle$. Muestra que los autovalores de H son al menos $2(2j+1)$ -plemente degenerados si $I_\perp \neq I_3$, y $(2j+1)$ -plemente degenerados si $I_\perp = I_3$.
6. Traza el diagrama de niveles del rotador rígido (j entero pues \mathbf{J} es suma de momentos orbitales; cf. Cap. X). ¿Qué ocurre para $I_\perp = I_3$ (rotador esférico)?

Ejercicio 5. Proyección angular y armónicos esféricos

Un sistema cuyo espacio de estados es \mathcal{H}_r tiene función de onda

$$\psi(\mathbf{r}) = \mathcal{N} (\alpha x + \beta y + \gamma z) e^{-r^2/2},$$

con α real dada y \mathcal{N} constante de normalización.

Se miden L_z y L^2 : ¿cuáles son las probabilidades de obtener $m = 0$ y $\hbar^2 \ell(\ell+1) = 2\hbar^2$? Recuerda que

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

y que

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

Usando además este último hecho, ¿es posible predecir directamente las probabilidades de todos los posibles resultados de medidas de L^2 y L_z en el sistema con función de onda $\psi(\mathbf{r})$?

Ejercicio 6. Sistema con $\ell = 1$ y campo de gradiente

Considera un sistema de momento angular $\ell = 1$. Una base de su espacio de estados está formada por los tres autovectores de L_z : $|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$, con autovalores $+\hbar, 0, -\hbar$, que satisfacen

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1) = 2\hbar^2, \quad L_+ |-1\rangle = \hbar\sqrt{2} |0\rangle, \quad L_- |+1\rangle = \hbar\sqrt{2} |0\rangle, \quad L_\pm |0\rangle = \hbar\sqrt{2} |\pm 1\rangle.$$

El sistema, con momento cuadrupolar eléctrico, se coloca en un gradiente de campo eléctrico, de modo que su Hamiltoniano es

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_\xi^2 - L_\eta^2),$$

donde L_ξ y L_η son las componentes de \mathbf{L} a lo largo de dos direcciones ξ, η en el plano que forman ángulos de 45° con Ox y Oy ; ω_0 es real.

1. Escribe la matriz que representa H en la base $\{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$. ¿Cuáles son los estados estacionarios y sus energías? (Denótalos $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ en orden de energías decrecientes.)
2. En $t = 0$, el sistema está en

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+1\rangle + |-1\rangle].$$
 ¿Cuál es $|\psi(t)\rangle$? En t , se mide L_z : ¿cuáles son las probabilidades de los distintos resultados?
3. Calcula $\langle L_x \rangle(t)$, $\langle L_y \rangle(t)$ y $\langle L_z \rangle(t)$. ¿Qué movimiento realiza el vector $\langle \mathbf{L} \rangle$?
4. En t , se mide L^2 .

- a) ¿Existen instantes en los que solo un resultado es posible?
- b) Si la medición arroja $2\hbar^2$, ¿cuál es el estado inmediatamente después? Indica, sin cálculo, su evolución posterior.

Ejercicio 7. Rotaciones en \mathbb{R}^3 y generadores

Considera rotaciones en el espacio tridimensional ordinario, denotadas $R_{\mathbf{u}}(\theta)$, donde \mathbf{u} es el versor del eje y θ el ángulo. Si M' es la imagen de M bajo una rotación infinitesimal de ángulo $\delta\theta$, muestra que

$$\overrightarrow{OM'} = \overrightarrow{OM} + \delta\theta \mathbf{u} \times \overrightarrow{OM}.$$

Si \overrightarrow{OM} está representado por el vector columna \mathbf{r} , ¿cuál es la matriz asociada a $R_{\mathbf{u}}(\theta)$? Deducir de ella las matrices que representan las componentes del operador \mathcal{R} definido por

$$R_{\mathbf{u}}(\delta\theta) = \mathbb{I} + \delta\theta \mathbf{u} \cdot \mathcal{R}.$$

Calcula los conmutadores $[\mathcal{R}_x, \mathcal{R}_y]$, $[\mathcal{R}_y, \mathcal{R}_z]$, $[\mathcal{R}_z, \mathcal{R}_x]$. ¿Cuáles son los análogos cuánticos de estas relaciones puramente geométricas? Partiendo de la matriz que representa \mathcal{R}_z , calcula la que representa $e^{\theta\mathcal{R}_z}$; muestra que $R_z(\theta) = e^{\theta\mathcal{R}_z}$. ¿Cuál es el análogo de esta relación en mecánica cuántica?

Ejercicio 8. Observable que conmuta con \mathbf{L} y operador unitario

Sea una partícula en 3D, con vector de estado $|\psi\rangle$ y función de onda $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$. Sea A un observable que conmuta con $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$, momento angular orbital de la partícula. Asumiendo que A , L^2 y L_z forman un C.C.C.O. en \mathcal{H}_r , llamemos $|a; \ell, m\rangle$ a sus autokets comunes, con autovalores a (índice discreto), $\hbar^2\ell(\ell+1)$ y $\hbar m$.

Sea $U(\alpha)$ el operador unitario

$$U(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha A},$$

con α real adimensional. Para un operador arbitrario X , llamamos \tilde{X} al transformado por $U(\alpha)$: $\tilde{X} = U(\alpha)XU^\dagger(\alpha)$. Definimos $L_+ = L_x + iL_y$ y $L_- = L_x - iL_y$.

1. Calcula \tilde{L}_+ y muestra que L_+ y \tilde{L}_+ son proporcionales; halla la constante de proporcionalidad. Lo mismo para L_- y \tilde{L}_- .
2. Expresa $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ en términos de L_x, L_y, L_z . ¿Qué transformación geométrica se asocia a la transformación de \mathbf{L} en $\tilde{\mathbf{L}}$?
3. Calcula los conmutadores $[A, L_+]$ y $[A, L_-]$. Muestra que los kets $|a; \ell, m \pm 1\rangle$ y $|a; \ell, m\rangle$ son autovectores de A y calcula sus autovalores.
4. ¿Qué relación debe existir entre m y m' para que el elemento de matriz $\langle a; \ell, m' | L_+ | a; \ell, m \rangle$ sea no nulo? ¿Y para L_- ?
5. Comparando los elementos de matriz de \tilde{L}_\pm con los de L_\pm , calcula $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ en términos de L_x, L_y, L_z . Da una interpretación geométrica.

Ejercicio 9. Estados de mínima incertidumbre para \mathbf{L}

Considera un sistema físico de momento angular fijo ℓ , con espacio de estados \mathcal{H}_ℓ y vector de estado $|\psi\rangle$; su momento angular orbital es \mathbf{L} . Suponemos que una base de \mathcal{H}_ℓ está compuesta por $2\ell + 1$ autovectores de (L^2, L_z) , asociados a funciones de onda $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$. Denotamos $\langle \mathbf{L} \rangle$ al valor medio de \mathbf{L} .

Primero, supón que $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$.

1. Entre todos los estados, ¿cuáles minimizan $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$? Muestra que, para esos estados, la desviación cuadrática media ΔL_u de la componente de \mathbf{L} a lo largo de un eje que forma un ángulo θ con Oz es

$$\Delta L_u = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sin \theta.$$

2. Ahora supón que $\langle \mathbf{L} \rangle$ tiene dirección arbitraria. Denotemos por (x', y', z') un triedro con Oz' dirigido a lo largo de $\langle \mathbf{L} \rangle$, con Ox' en el plano (Oz, Oz') .

a) Muestra que el estado $|\psi_0\rangle$ que minimiza $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ cumple

$$(L_{x'} + iL_{y'})|\psi_0\rangle = 0, \quad L_{z'}|\psi_0\rangle = \hbar\ell|\psi_0\rangle.$$

b) Sean θ_0 el ángulo entre Oz y Oz' , y φ_0 el ángulo entre Ox y Ox' . Prueba las relaciones

$$L_+ = \cos^2 \frac{\theta_0}{2} e^{-i\varphi_0} L_{+'} + \sin^2 \frac{\theta_0}{2} e^{i\varphi_0} L_{-'} + \sin \theta_0 L_{z'},$$

$$L_z = \sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} e^{-i\varphi_0} L_{+'} + \sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} e^{i\varphi_0} L_{-'} + \cos \theta_0 L_{z'}.$$

Si definimos $e^{i\gamma_0} = \frac{\cos \frac{\theta_0}{2}}{\sin \frac{\theta_0}{2}} e^{-i\varphi_0}$, muestra que

$$L_+ |\psi_0\rangle = \tan \frac{\theta_0}{2} e^{-i\varphi_0} \hbar \sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)} |\ell, m+1\rangle, \quad m = \ell - 1.$$

Expresa $|\psi_0\rangle$ en términos de $\ell, \theta_0, \varphi_0$ y γ_0 .

c) Para calcular la función de onda, muestra que la asociada a $|\psi_0\rangle$ es $\psi_0(\theta, \varphi) = \mathcal{D}_{\ell, m}^\ell(\alpha, \beta, \gamma) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$, donde \mathcal{D} es una matriz de Wigner (cf. Cap. VI). Sustituyendo L_\pm y L_z por sus expresiones en términos de (x', y', z') , halla un coeficiente explícito y la relación

$$|\langle \ell, m | \psi_0 \rangle|^2 = \binom{2\ell}{\ell+m} \left(\sin \frac{\theta_0}{2} \right)^{2(\ell+m)} \left(\cos \frac{\theta_0}{2} \right)^{2(\ell-m)}.$$

d) Con el sistema en $|\psi_0\rangle$, se mide L_z . ¿Cuáles son las probabilidades de los distintos resultados? ¿Cuál es el resultado más probable? Muestra que, si $\ell \gg 1$, los resultados corresponden al límite clásico.

Ejercicio 10. Desigualdades de incertidumbre para \mathbf{J}

Sea \mathbf{J} el operador momento angular de un sistema físico arbitrario con vector de estado $|\psi\rangle$. ¿Pueden hallarse estados para los cuales las desviaciones típicas $\Delta J_x, \Delta J_y, \Delta J_z$ sean simultáneamente nulas?

Prueba la relación

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_z \rangle|$$

y las obtenidas por permutación cíclica de x, y, z . Sea $\langle \mathbf{J} \rangle$ el valor medio del momento angular del sistema, y supón que los ejes se eligen de modo que $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$. Muestra que

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 \geq \hbar |\langle J_z \rangle|.$$

Muestra que ambas desigualdades se saturan si y solo si $J_+ |\psi\rangle = 0$ o $J_- |\psi\rangle = 0$.

Considera ahora una partícula sin espín, para la cual $\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$. Muestra que no es posible tener simultáneamente $\Delta J_x \Delta J_y = \hbar/2$ y $(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 = \hbar$ a menos que la función de onda sea de la forma

$$\psi(\theta, \varphi) = f(\theta) \sin \theta e^{i\varphi}.$$

Ejercicio 11. Oscilador armónico 3D y \mathbf{L}

Considera un oscilador armónico tridimensional, con vector de estado

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle_x \otimes |\beta\rangle_y \otimes |\gamma\rangle_z,$$

donde $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$ son estados cuasi-clásicos (cf. Complemento GV) de osciladores 1D a lo largo de x, y, z , respectivamente. Sea $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ el momento angular orbital del oscilador 3D.

Prueba que

$$\langle L_z \rangle = \hbar \text{Im}(\alpha\beta^*), \quad \Delta L_z = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + 2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2},$$

y expresiones análogas para las componentes a lo largo de x e y .

Supón ahora que $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$ y $\langle L_z \rangle = \hbar \ell_0$ con $\ell_0 > 0$. Muestra que debe ser $\gamma = 0$. Fijado $\|\alpha\|$, muestra que, para minimizar $\Delta L_x + \Delta L_y$, se debe elegir

$$\alpha = \beta = \frac{\rho}{\sqrt{2}} e^{i\phi_0}$$

(con ϕ_0 real arbitrario). ¿Toman $\Delta L_x \Delta L_y$ y $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2$ valores mínimos compatibles con las desigualdades del ejercicio anterior?

Muestra que el estado de un sistema que satisface las condiciones precedentes es necesariamente de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} c_{n_x n_y 0} |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |0\rangle,$$

con

$$c_{n_x n_y 0} = \frac{(\alpha + i\beta)^{n_x}}{\sqrt{n_x!}} \frac{(\alpha - i\beta)^{n_y}}{\sqrt{n_y!}} e^{-(|\alpha|^2 + |\beta|^2)/2}, \quad \alpha = \frac{\rho}{\sqrt{2}} e^{i\phi_0}.$$

Usando resultados del Complemento GV y del §4 del Complemento DVI, muestra que la dependencia angular de Ψ para $n_z = 0$ es $(\sin \theta e^{i\varphi})^\ell$.

Si se mide L^2 sobre un sistema en el estado $|\Psi\rangle$, muestra que las probabilidades de los posibles resultados siguen una distribución de Poisson. ¿Qué resultados pueden obtenerse en una medición de L_z que sigue a una medición de L^2 con resultado $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$?

Nota sobre la bibliografía del Ejercicio 4: Landau y Lifshitz (1.19), §101; Ter Haar (1.23), §§8.13 y 8.14.

Complemento FVII: Acoplamiento vibración–rotación en diatómicas

Las transiciones rotacionales puras de una molécula diatómica no son estrictamente equiespaciadas: la separación entre líneas disminuye con el número cuántico rotacional J . Esto refleja el *acoplamiento vibración–rotación*.

Agrupando los términos rotacionales y sustituyendo el parámetro rotacional por su dependencia vibracional, se obtiene una energía vibro–rotacional del tipo

$$E_{vJ} = \hbar\omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) + B_e J(J+1) - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2}\right) J(J+1) + \dots \quad (53)$$

lo que puede reescribirse como

$$E_{vJ} = \hbar\omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) + B_v J(J+1), \quad (54)$$

con un *constante rotacional efectivo*

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2}\right). \quad (55)$$

Interpretación clásica: $B \propto \langle 1/R^2 \rangle$ [cf. fórmula (16)]. Al vibrar la molécula, R varía y, dado que $\omega_{\text{vib}} \gg \omega_{\text{rot}}$, tiene sentido un promedio temporal de $1/R^2$ sobre muchos periodos vibracionales. Dos efectos compiten:

- **Anharmonicidad del potencial $V(R)$:** por la asimetría (la molécula *pasa más tiempo* en $R > R_e$ que en $R < R_e$), $\langle 1/R^2 \rangle$ disminuye con la amplitud de vibración (con v); esto *reduce* B_v y hace $\alpha_e > 0$.
- **Convexidad:** aun si el movimiento fuese simétrico, $\langle 1/R^2 \rangle \neq 1/\langle R^2 \rangle$; de hecho, por convexidad $\langle 1/R^2 \rangle \geq 1/\langle R^2 \rangle$.

En general domina el término anarmónico, por lo que B_v decrece con v .
extbfComentarios.

- El acoplamiento vibro-rotacional existe incluso para $v = 0$: $B_0 = B_e - \frac{1}{2}\alpha_e$ [cf. (57)], consecuencia de la extensión finita ΔR del estado fundamental vibracional.
- Experimentalmente, si $\alpha_e > 0$ la estructura rotacional es ligeramente más compacta en estados vibracionales altos que en los bajos; las ramas P y R se ven afectadas de modo diferente y las líneas dejan de ser equidistantes (en promedio, más próximas en R que en P).

extbfExpansión típica de niveles vibro-rotacionales. Truncando a bajos órdenes (parámetros de Dunham),

$$E_{vJ} = D_0 + \hbar\omega_e\left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_e x_e\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + B_e J(J+1) - \alpha_e\left(v + \frac{1}{2}\right)J(J+1) - D_e [J(J+1)]^2 + \dots \quad (58)$$

con: D_0 energía de disociación; ω_e frecuencia vibracional; B_e constante rotacional; x_e , α_e , D_e constantes adimensionales de anharmonicidad y acoplamiento [cf. (40), (46), (52)].

Complemento GVII: Ejercicios

Ejercicio 1. Partícula en potencial con simetría cilíndrica

Sean (ρ, φ, z) coordenadas cilíndricas de una partícula sin espín ($x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, $\rho \geq 0$, $0 \leq \varphi < 2\pi$). Supón que la energía potencial V depende solo de ρ y z (no de φ). Recuerda que

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

1. Escribe, en coordenadas cilíndricas, el operador diferencial del Hamiltoniano $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\rho, z)$. Muestra que H conmuta con P_z y con L_z . Concluye que los autoestados estacionarios pueden escribirse como

$$\psi_{m,k}(\rho, \varphi, z) = R_{m,k}(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz},$$

indicando los posibles valores de $m \in \mathbb{Z}$ y $k \in \mathbb{R}$.

2. Escribe la ecuación de autovalores de H en coordenadas cilíndricas y deduce la ecuación diferencial radial para $R_{m,k}(\rho)$.
3. Sea Σ el operador que, en representación \mathbf{r} , actúa como $\varphi \mapsto -\varphi$ (reflexión respecto del plano Ox). ¿Conmuta Σ con H ? Muestra que Σ anticommuta con L_z y que, en consecuencia, si ψ es autovector de L_z con $m \neq 0$, entonces $\Sigma\psi$ lo es con autovalor $-m$. ¿Qué concluyes sobre la degeneración de niveles? ¿Podía predecirse directamente a partir de la ecuación radial (dependencia en m^2)?

Ejercicio 2. Oscilador 3D en campo magnético uniforme

Objetivo: estudiar un sistema simple donde el efecto de un campo magnético uniforme puede calcularse exactamente y comparar términos “paramagnético” y “diamagnético”. También se detalla la modificación del estado fundamental.

Considera una partícula de masa m con

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \mathbf{R}^2$$

(oscilador armónico tridimensional isotrópico), con $\omega_0 > 0$ fija.

1. Halla los niveles de energía de H_0 y sus degeneraciones. ¿Es posible construir una base de autovectores comunes de H_0 , L^2 y L_z ?

2. Ahora, la partícula de carga q se coloca en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} \parallel Oz$. Definimos $\omega_c = \frac{qB}{m}$ y usamos el calibre simétrico $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$. El Hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \mathbf{R}^2 = H_0 - \frac{qB}{2m} L_z + \frac{q^2 B^2}{8m} \rho^2 \equiv H_0 + H_1(B),$$

donde el término lineal en B es *paramagnético* ($\propto -\frac{\omega_c}{2} L_z$) y el cuadrático es *diamagnético* ($\propto \omega_c^2 \rho^2$). Muestra que los nuevos estados estacionarios y sus degeneraciones pueden determinarse exactamente (desacople en z y reducción a dos osciladores en el plano con frecuencias efectivas $\sqrt{\omega_0^2 + (\omega_c/2)^2} \pm \omega_c/2$).

3. Si $\omega_c \ll \omega_0$, muestra que el efecto diamagnético es despreciable frente al paramagnético.
4. Considera el primer nivel excitado (energías que tienden a $\frac{5}{2} \hbar \omega_0$ cuando $B \rightarrow 0$). A primer orden en B , ¿cuáles son los niveles (efecto Zeeman del oscilador 3D) y sus degeneraciones? Misma pregunta para el segundo nivel excitado.
5. Considera el estado fundamental. ¿Cómo varía su energía con B (efecto diamagnético)? Calcula su susceptibilidad magnética. ¿Es el fundamental, en presencia de \mathbf{B} , autovector de L^2 ? ¿de L_x o L_y ? Da la forma de su función de onda y la corriente de probabilidad correspondiente. Muestra que el efecto del campo es comprimir la función de onda en el plano transversal por un factor $[1 + (\frac{\omega_c}{2\omega_0})^2]^{1/4}$ e inducir una corriente azimutal.

Examen parcial — Transcripción literal

material, excepto su hoja de notas. El examen dura 4 horas y debe estar correctamente escrito y argumentado. No se pueden hacer preguntas, la comprensión de las mismas hace parte de su evaluación.

1. (12 puntos). Conceptos

Elija tres (3) parejas de conceptos dada a continuación y discuta sus diferencias o semejanzas (al menos dos).

- Estado cuántico y función de onda.
- Desigualdad de Robertson–Schrödinger (Relación de incertidumbre) y relación de incertidumbre energía–tiempo.
- Medición proyectiva y valor esperado de un observable.
- Momentum angular orbital y espín.

2. (10 puntos). Momentum Angular Orbital y Simetría Esférica

Elija uno (1) de los siguientes ejercicios:

- (a) Demuestre que los operadores de MA: \hat{L}^2 y \hat{L}_z , conmutan con el hamiltoniano de un sistema sometido a una interacción central. Hint: Hay varios caminos pero uno de los más eficaces es mostrar que $[\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0$ y $[\hat{L}_i, \hat{x}^2] = 0$, y a partir de aquí argumentar la respuesta al problema.
- (b) Aplicando el operador \hat{L}^2 en su representación de posición, verifique que $Y_{2,0}$ es una autofunción con autovalor $6\hbar^2$.

3. (8 puntos). Degeneración para el átomo de H

Calcule la degeneración de un nivel de energía E_n del átomo de Hidrógeno. Considere el espín del electrón.

4. (24 puntos). Ión Atómico y MA

El hamiltoniano de un ión atómico en un cristal puede escribirse como:

$$\hat{H} = a(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) + b\hat{L}_z,$$

donde a y b son constantes reales con las unidades adecuadas. Considere que el ión tiene momentum angular $l = 1$ y no considere el espín.

- (a) 8 pt. Escriba la forma matricial del Hamiltoniano en la base $|l, m\rangle$, donde $|l, m\rangle$ son los autoestados usuales de MA. Note que es una matriz 3×3 .
- (b) 8 pt. Determine los autoestados y autovalores de energía del ión.
- (c) 8 pt. Considere que el ión se prepara en el estado inicial

$$|\psi(0)\rangle = \frac{3}{5}|1, 0\rangle + \frac{4i}{5}|1, 1\rangle.$$

Calcule la evolución temporal $|\psi(t)\rangle$ usando como condición inicial el anterior estado.

5. (26 puntos). Estados coherentes del Oscilador Armónico

Considere un oscilador armónico cuántico unidimensional de masa m y frecuencia ω . Los autoestados del operador escalera a son los llamados estados coherentes del OA que están dados por una superposición de autoestados de número $\{|n\rangle\}$, de la forma:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

donde $\alpha \in \mathbb{C}$ es un número complejo arbitrario.

- (a) 8 pt. Demuestre que el estado coherente $|\alpha\rangle$ es un autoestado normalizado de a con autovalor α , i.e. $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.
- (b) 8 pt. Calcule el valor esperado del operador número y de la energía del OA para este estado coherente $|\alpha\rangle$.
- (c) 10 pt. Calcule los valores esperados $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$ y $\langle\hat{p}^2\rangle$ y demuestre que los estados coherentes satisfacen la igualdad en la relación de Robertson–Schrödinger: $\Delta x \Delta p = \hbar/2$, i.e. los estados coherentes minimizan las fluctuaciones cuánticas (de aquí el nombre e importancia de los estados coherentes).

6. (20 puntos). Estados del átomo de H $|n, l, m\rangle$

Un átomo de Hidrógeno se prepara inicialmente en el estado de superposición:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}|2, 1, 1\rangle - \frac{2}{\sqrt{14}}|3, 2, -1\rangle + \frac{3i}{\sqrt{14}}|4, 2, 2\rangle.$$

- (a) 5 pt. ¿Cuáles son los posibles resultados de una medición de la energía y con qué probabilidades ocurrirían? Calcule el valor esperado de la energía.
- (b) 5 pt. ¿Cuáles son los posibles resultados de una medición de \hat{L}^2 y con qué probabilidades ocurrirían? Calcule el valor esperado de \hat{L}^2 .
- (c) 5 pt. ¿Cuáles son los posibles resultados de una medición de \hat{L}_z y con qué probabilidades ocurrirían? Calcule el valor esperado de \hat{L}_z .
- (d) 5 pt. Determine el estado evolucionado en el tiempo. ¿Cuál de las respuestas anteriores depende del tiempo?

Soluciones del Examen parcial

1. (12 puntos). Conceptos

Compare y contraste (se incluyen las cuatro parejas para completitud):

- **Estado cuántico vs función de onda.** Un estado puro es un ket $|\psi\rangle$ (o un operador densidad ρ) en un espacio de Hilbert; la función de onda $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ es la *representación* del mismo estado en la base de posición (cambia de forma al cambiar de base). El ket está definido salvo una fase global y contiene toda la información física; una función de onda no normalizable no describe un estado físico.
- **Robertson–Schrödinger vs energía–tiempo.** Para dos observables A, B ,

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \langle \{ \Delta A, \Delta B \} \rangle \right)^2.$$

La “incertidumbre energía–tiempo” no surge de un operador tiempo (no existe como observable universal), sino de cotas a la velocidad de cambio del estado: p.ej. Mandelstam–Tamm $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, donde Δt caracteriza la escala temporal de evolución de un observable o del estado.

- **Medición proyectiva vs valor esperado.** Una medición proyectiva de A da un autovalor a con probabilidad $p(a) = \|\Pi_a |\psi\rangle\|^2$ y el estado colapsa a $\Pi_a |\psi\rangle / \sqrt{p(a)}$. El valor esperado $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \text{Tr}(\rho A)$ es un promedio estadístico y no tiene por qué coincidir con un resultado de una sola medición.
- **Momento angular orbital vs espín.** $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ es *extrínseco* (entero $l = 0, 1, \dots$) y está ligado a rotaciones espaciales; el espín \mathbf{S} es *intrínseco* (puede ser semientero) y no tiene análogo clásico. Ambos satisfacen el álgebra $[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$ y se acoplan por suma de momentos angulares.

2. (10 puntos). MA orbital y simetría esférica

- (a) Para $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(r)$, usando $[L_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$ y $[L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$ se obtiene $[L_i, \mathbf{X}^2] = 0$ y $[L_i, \mathbf{P}^2] = 0$. Entonces $[L_i, H] = 0$, por lo que $[L^2, H] = 0$ y $[L_z, H] = 0$. Concluye que se pueden elegir autoestados comunes de H , L^2 y L_z .
- (b) En representación de ángulos,

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

Los armónicos esféricos satisfacen $L^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$, así que $L^2 Y_{2,0} = 6\hbar^2 Y_{2,0}$.

3. (8 puntos). Degeneración en H

En el átomo de H (sin estructura fina/Zeeman), E_n depende sólo de n . Para cada n hay n^2 estados espaciales $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$. Incluyendo el espín del electrón (2 posibilidades), la degeneración es

$$g_n = 2n^2.$$

4. (24 puntos).IÓN atómico y MA ($l = 1$)

$$\hat{H} = a(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) + b\hat{L}_z = a(L^2 - L_z^2) + bL_z.$$

En la base $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$, $L_z |1, m\rangle = \hbar m |1, m\rangle$ y $L^2 = 2\hbar^2$.

- (a) Matriz (ya diagonal):

$$[H] = \text{diag}(a\hbar^2 + b\hbar, 2a\hbar^2, a\hbar^2 - b\hbar).$$

(b) Autoestados: $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ con energías

$$E_{+1} = a\hbar^2 + b\hbar, \quad E_0 = 2a\hbar^2, \quad E_{-1} = a\hbar^2 - b\hbar.$$

(c) Con $|\psi(0)\rangle = \frac{3}{5}|1, 0\rangle + \frac{4i}{5}|1, 1\rangle$, la evolución es

$$|\psi(t)\rangle = \frac{3}{5}e^{-iE_0t/\hbar}|1, 0\rangle + \frac{4i}{5}e^{-iE_{+1}t/\hbar}|1, 1\rangle.$$

Un desfase global puede omitirse si se desea.

5. (26 puntos). Estados coherentes del OA

Sea $H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$, $N = a^\dagger a$.

(a) Con $|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$,

$$a|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n \geq 1} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} |n-1\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

Normalización: $\langle\alpha|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1$.

(b) $\langle N \rangle = |\alpha|^2$, $\langle H \rangle = \hbar\omega(|\alpha|^2 + \frac{1}{2})$.

(c) Con $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$, $p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a)$, se tiene

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} \alpha, \quad \langle p \rangle = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im} \alpha,$$

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \Delta p^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}, \quad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

Además $\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2 + \frac{\hbar}{2m\omega}$ y $\langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2 + \frac{\hbar m\omega}{2}$.

6. (20 puntos). Estados del átomo de H

Estado inicial $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}|2, 1, 1\rangle - \frac{2}{\sqrt{14}}|3, 2, -1\rangle + \frac{3i}{\sqrt{14}}|4, 2, 2\rangle$.

(a) Los posibles resultados de energía son E_n con $n = 2, 3, 4$, con probabilidades $1/14, 4/14, 9/14$.
Valor esperado usando $E_n = -\operatorname{Ry}/n^2$:

$$\langle H \rangle = -\operatorname{Ry} \left(\frac{1}{56} + \frac{2}{63} + \frac{9}{224} \right) = -\operatorname{Ry} \frac{181}{2016}.$$

(b) Para $L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$: $\ell = 1$ con prob. $1/14$ y $\ell = 2$ con prob. $13/14$. Entonces

$$\langle L^2 \rangle = \frac{1}{0} 14(2\hbar^2) + \frac{13}{14}(6\hbar^2) = \frac{40}{7}\hbar^2.$$

(c) Para $L_z = \hbar m$: $m = 1$ (prob. $1/14$), $m = -1$ (prob. $4/14$), $m = 2$ (prob. $9/14$). Así,

$$\langle L_z \rangle = \hbar \left(\frac{1}{14} - \frac{4}{14} + \frac{18}{14} \right) = \frac{15}{14}\hbar.$$

(d) La evolución temporal (ignorando estructura fina) depende sólo de n :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}e^{-iE_2t/\hbar}|2, 1, 1\rangle - \frac{2}{\sqrt{14}}e^{-iE_3t/\hbar}|3, 2, -1\rangle + \frac{3i}{\sqrt{14}}e^{-iE_4t/\hbar}|4, 2, 2\rangle.$$

Las probabilidades y los valores esperados de (a)–(c) son constantes en el tiempo porque $[H, L^2] = [H, L_z] = 0$. Sólo el estado (fase relativa) depende de t .

Ejercicio 6. Sistema con $\ell = 1$ y gradiente eléctrico

Considera un sistema de momento angular $\ell = 1$. Una base de su espacio de estados está formada por los tres autovectores de L_z : $|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$, con autovalores $\hbar, 0$ y $-\hbar$, que satisfacen

$$L_{\pm}|m\rangle = \hbar\sqrt{2}|m \pm 1\rangle, \quad L_+|+1\rangle = 0, \quad L_-|-1\rangle = 0.$$

El sistema, con momento cuadrupolar eléctrico, se coloca en un gradiente de campo de modo que el Hamiltoniano es

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_u^2 - L_v^2),$$

donde L_u y L_v son las componentes de \mathbf{L} en dos direcciones del plano xOz que forman ángulos de 45° con los ejes Ox y Oz , y $\omega_0 \in \mathbb{R}$.

1. Escribe la matriz que representa H en la base $\{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$. ¿Cuáles son los estados estacionarios $|E_1\rangle, |E_2\rangle, |E_3\rangle$ y sus energías, en orden de mayor a menor?
2. En $t = 0$, el sistema está en

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+1\rangle - |-1\rangle].$$

¿Cuál es $|\psi(t)\rangle$? A tiempo t , se mide L_z : ¿con qué probabilidades se obtiene $\hbar, 0$ o $-\hbar$?

3. Calcula $\langle L_x \rangle(t)$, $\langle L_y \rangle(t)$ y $\langle L_z \rangle(t)$. Describe el movimiento del vector $\langle \mathbf{L} \rangle$.
4. A tiempo t , se mide L_z^2 .
 - a) ¿Existen instantes en los que solo un resultado sea posible?
 - b) Si la medida arroja \hbar^2 , ¿qué estado queda inmediatamente después y cuál será su evolución posterior?

Ejercicio 10. Incertidumbres y desigualdades para el momento angular

Sea \mathbf{J} el operador de momento angular de un sistema físico arbitrario con vector de estado $|\psi\rangle$.

1. ¿Existen estados tales que $\Delta J_x, \Delta J_y$ y ΔJ_z sean simultáneamente cero?
2. Demuestra la relación

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_z \rangle|$$

y las obtenidas por permutación cíclica de x, y, z . Suponiendo $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$, muestra que

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 \geq \hbar |\langle J_z \rangle|.$$

3. Muestra que ambas desigualdades se convierten en igualdades si y sólo si

$$J_+ |\psi\rangle = 0 \quad \text{o} \quad J_- |\psi\rangle = 0.$$

4. Para una partícula sin espín ($\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$), demuestra que no es posible tener simultáneamente

$$\Delta L_x \Delta L_y = \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle| \quad \text{y} \quad (\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 = \hbar |\langle L_z \rangle|$$

a menos que la función de onda sea de la forma

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r, \sin \theta e^{\pm i\varphi}).$$

Ejercicio 1. Partícula en potencial cilíndricamente simétrico

Sean (ρ, φ, z) las coordenadas cilíndricas de una partícula sin espín ($x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, $\rho \geq 0$, $0 \leq \varphi < 2\pi$). Supóngase que su energía potencial V depende únicamente de ρ y z (no de φ). Recuerde que

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

1. Escriba, en coordenadas cilíndricas, el operador diferencial del Hamiltoniano. Demuestre que $[H, L_z] = 0$ y $[H, P_z] = 0$. Concluya que los autoestados estacionarios pueden escribirse como

$$\psi_{m,k}(\rho, \varphi, z) = f_{m,k}(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz},$$

indicando los posibles valores $m \in \mathbb{Z}$ y $k \in \mathbb{R}$.

2. Escriba, en coordenadas cilíndricas, la ecuación de autovalores de H y derive la ecuación diferencial que satisface $f_{m,k}(\rho)$.
3. Sea Σ el operador que, en la representación $|\mathbf{r}\rangle$, actúa como $(\rho, \varphi, z) \mapsto (\rho, -\varphi, z)$ (reflexión respecto al plano xOz). ¿Conmuta Σ con H ? Demuestre que ΣL_z anticommuta y, en consecuencia, si $\Sigma_{\phi_n, m, k}$ es autovector de L_z con autovalor $?$. ¿Qué concluye sobre la degeneración de los niveles de energía? ¿Podría predecirse esto directamente de la ecuación diferencial obtenida en el apartado anterior (2)?

Ejercicio 2. Oscilador armónico tridimensional en campo magnético uniforme

Estudiar un sistema sencillo en el que el efecto de un campo magnético uniforme se puede calcular exactamente, comparando los términos “paramagnético” y “diamagnético” y analizando la modificación del estado fundamental.

Consideremos una partícula de masa m cuyo Hamiltoniano libre es

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \mathbf{R}^2, \quad \omega_0 > 0 \text{ constante,}$$

correspondiente al oscilador armónico tridimensional isotrópico.

- a) Halla los niveles de energía de H_0 y sus degeneraciones. ¿Es posible construir una base de autoestados comunes a H_0 , L^2 y L_z ?
- b) Ahora, colocamos la partícula de carga q en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} \parallel Oz$. Definimos

$$\omega_L = \frac{qB}{m}, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (\text{calibre simétrico}).$$

El Hamiltoniano total es

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} - q \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \mathbf{R}^2 = H_0 - \frac{qB}{2m} L_z + \frac{q^2 B^2}{8m} \rho^2 \equiv H_0 + H_1(B),$$

donde el término lineal en B es *paramagnético* $\propto -\frac{\omega_L}{2} L_z$ y el cuadrático es *diamagnético* $\propto \omega_L^2 \rho^2$. Muestra que los nuevos autoestados y sus degeneraciones se obtienen exactamente.

- c) Demuestra que, si $\omega_L \ll \omega_0$, el efecto diamagnético es despreciable frente al paramagnético.
- d) Considera el primer nivel excitado del oscilador (energía límite $\frac{5}{2} \hbar \omega_0$ para $B \rightarrow 0$). A primer orden en ω_L/ω_0 , ¿cuáles son los niveles en presencia del campo \mathbf{B} (efecto Zeeman) y sus degeneraciones? Repite el análisis para el segundo nivel excitado.
- e) Ahora considera el estado fundamental.

- ¿Cómo varía su energía con ω_L (efecto diamagnético)?

- Calcula la susceptibilidad magnética χ .
- En presencia de \mathbf{B} , ¿es el estado fundamental autovector de L^2 ? ¿de L_z ? ¿de L_x ?
- Da la forma de su función de onda y la corriente de probabilidad asociada.
- Muestra que el campo comprime la función de onda en el plano transversal por un factor $[1 + (\frac{\omega_L}{\omega_0})^2]^{1/4}$ e induce una corriente azimutal.