Evaluación III. Mecánica Cuántica

Rubén Carrión Castro

Noviembre 2024

1. **Considera los estados $|\mathbf{\Psi_{xz}}\rangle$ y $|\mathbf{\Psi_{yz}}\rangle$ con funciones de onda**

$$\langle \overrightarrow{x} | \mathbf{\Psi_{xz}} \rangle = \mathbf{n(x-z)e^{-(x^2+y^2+z^2)}} \quad \mathbf{y} \quad \langle \overrightarrow{x} | \mathbf{\Psi_{yz}} \rangle = \mathbf{n(y-z)e^{-(x^2+y^2+z^2)}},$$

siendo n un factor de normalización.

(a) **Si una partícula de espín 0 se encuentra en el estado $|\mathbf{\Psi}\rangle = |\mathbf{\Psi_{xz}}\rangle$, determina $\langle \mathbf{L^2} \rangle_{\psi}, \langle \mathbf{L_z} \rangle_{\mathbf{\Psi}}$ y $\langle \mathbf{L_x} \rangle_{\mathbf{\Psi}}$.**

(b) **Si una partícula de espín 1/2 se encuentra en el estado**

$$|\mathbf{\Psi}\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} \left(\sqrt{\mathbf{3}}\, |\mathbf{\Psi_{xz}}\rangle \otimes |+\rangle - |\mathbf{\Psi_{zy}}\rangle \otimes |-\rangle \right) \in \mathcal{H}^{\text{orb}} \otimes \mathcal{H}^{\text{spin}},$$

¿cuál es la probabilidad de obtener $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$ al medir $\mathbf{S_z}$ en la posición $\mathbf{x=2, y=1, z=1}$?

Ayuda: **Los primeros armónicos esféricos son**

$$\mathbf{Y_0^0} = \sqrt{\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{4}\pi}}, \quad \mathbf{Y_1^0} = \sqrt{\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{4}\pi}} \cos\theta, \quad \mathbf{Y_1^{\pm 1}} = \mp \sqrt{\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{8}\pi}} \sin\theta \mathbf{e^{\pm i\varphi}}.$$

Apartado (a)

Tenemos una partícula de $s = 0$ en el estado $\langle \overrightarrow{x} | \Psi_{xz} \rangle = n(x-z)e^{-(x^2+y^2+z^2)}$.
Como vemos que tienen una simetría muy particular, sobre todo las exponenciales, vamos a pasarlos a coordenadas esféricas,

$$\left.\begin{array}{cc} x = r\sin\theta\cos\varphi & r \in [0, +\infty) \\ y = r\sin\theta\sin\varphi & \theta \in [-\pi/2, \pi/2) \\ z = r\cos\theta & \varphi \in [-\pi, \pi] \end{array}\right\} \Longrightarrow \langle \overrightarrow{x} | \Psi_{xz} \rangle = n\left(r\sin\theta\cos\varphi - r\cos\theta\right)e^{-r^2}$$

Ahora vemos que podemos expresar nuestro estado en término de los armónicos esféricos. Vemos que tenemos $\cos\theta$ y $\sin\theta$, por lo que tendremos una combinación entre los armónicos esféricos Y_1^0 e $Y_1^{\pm 1}$, veamos esto,
Primero vamos a pasar el $\cos\varphi$ a exponencial,

$$\cos\varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned}
\langle \overrightarrow{x} | \Psi_{xz} \rangle &= nre^{-r^2}\left[\sin\theta\cos\varphi - \cos\theta\right] = nre^{-r^2}\left[\sin\theta \frac{e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}}{2} - \cos\theta\right] = \\
&= nre^{-r^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} - \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\right] = \\
&= nre^{-r^2}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[-Y_1^1 + Y_1^{-1} - \sqrt{2}Y_1^0\right]
\end{aligned}$$

Vemos que todos los armónicos tienen $l = 1$, por tanto, el momento angular orbital de nuestra partícula será 1. Hacemos $f(r) = Nre^{-r^2}$, donde $N = n \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{3}}C = n \cdot K$, donde $K = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}C$ es la constante de normalización de la parte armónica. Así,

$$\langle \overrightarrow{x} | \Psi_{xz} \rangle = \left[-Y_1^1 + Y_1^{-1} - \sqrt{2}Y_1^0\right] K = f(r)g(\theta,\varphi) = \Psi(r,\theta,\varphi)$$

Por tanto, tenemos que el estado es separable. Lo normalizamos, donde

$$g(\theta,\varphi) = \left[-Y_1^1 + Y_1^{-1} - \sqrt{2}Y_1^0\right] K; \qquad f(r) = Nre^{-r^2}$$

aplicando la condición de normalización en cada parte, tenemos

$$\begin{aligned}
1 &= \int dr|f(r)|^2 = \int_0^\infty drN^2r^2e^{-2r^2} = \left\{\begin{array}{c} t = 2r^2 \\ dt = 2rdr \\ r^2 = t/2 \end{array}\right\} = N^2\int_0^\infty \frac{t}{2}e^{-t}\frac{1}{2\sqrt{t/2}}dt = \\
&= N^2\frac{\sqrt{2}}{4}\int_0^\infty t^{-1/2}e^{-t}dt = N^2\frac{1}{2\sqrt{2}}\int_0^\infty t^{1/2-1}e^{-t}dt = \left\{\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt\right\} = \frac{N^2}{2^{3/2}}\Gamma(1/2) = N^2\frac{\sqrt{\pi}}{2^{3/2}}
\end{aligned}$$

Por tanto, la constante de normalización de la parte radial es,

$$N = \sqrt{\frac{2^{3/2}}{\sqrt{\pi}}}$$

Ahora vamos con la parte angular,

$$\begin{aligned}
1 &= \int_\Omega d\Omega|g(\theta,\varphi|^2 = K^2|\left[(Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0)|(Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0)\right]|^2 = \\
&= K^2(1+1+2) = 4K^2
\end{aligned}$$

esto es así debido a la ortogonalidad entre los armónicos esféricos. Por tanto, la constante de normalización queda,

$$K = \frac{1}{2}$$

Determinamos $\langle L^2 \rangle_\Psi$, como $l = 1$, entonces $L^2 |\Psi\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l \ \ m\rangle = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\varphi)$

$$\begin{aligned}
\langle L^2 \rangle_\Psi &= \langle \Psi | L^2 | \Psi \rangle = \langle g(\theta,\varphi) | L^2 | g(\theta,\varphi) \rangle = \frac{1}{4}\langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | L^2 | (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) \rangle = \\
&= \frac{1}{4}\langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | 2\hbar^2 (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) \rangle = \frac{1}{4}2\hbar^2(1+1+2) = 2\hbar^2 \ \checkmark
\end{aligned}$$

Determinamos $\langle L_z \rangle_\Psi$, tal que $L_z |\Psi\rangle = \hbar m |l \ \ m\rangle = \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi)$,

$$\begin{aligned}
\langle L_z \rangle_\Psi &= \langle \Psi | L_z | \Psi \rangle = \langle g(\theta,\varphi) | L_z | g(\theta,\varphi) \rangle = \frac{1}{4}\langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | L_z | (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) \rangle = \\
&= \langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | (-\hbar Y_1^{-1} - \hbar Y_1^1 - \sqrt{2} \cdot 0 \cdot Y_1^0) \rangle = \frac{1}{4}\hbar(-1+1) = 0 \ \checkmark
\end{aligned}$$

Determinamos $\langle L_x \rangle_\Psi$, tal que $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$, tal que $L_\pm \left| l \;\; m \right\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}Y_l^{m\pm 1}$, así,

$$\langle L_x \rangle_\Psi = \langle \Psi | L_x | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(\frac{1}{2}(L_+ + L_-) \right) | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle \Psi | L_+ | \Psi \rangle + \langle \Psi | L_- | \Psi \rangle \right]$$

Vamos a hacerlos uno por uno,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | L_+ | \Psi \rangle &= \tfrac{1}{4} \langle g(\theta,\varphi) | L_+ | g(\theta,\varphi) \rangle = \tfrac{1}{4} \langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | L_+ | (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) \rangle = \\ &= \tfrac{1}{4} \langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | (\hbar\sqrt{2}Y_1^0 - \hbar\sqrt{2}\sqrt{2}Y_1^1) \rangle = \tfrac{1}{4}(2\hbar - 2\hbar) = \\ \langle \Psi | L_- | \Psi \rangle &= \tfrac{1}{4} \langle g(\theta,\varphi) | L_- | g(\theta,\varphi) \rangle = \tfrac{1}{4} \langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | L_- | (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) \rangle = \\ &= \tfrac{1}{4} \langle (Y_1^{-1} - Y_1^1 - \sqrt{2}Y_1^0) | (-\hbar\sqrt{2}Y_1^0 - \hbar\sqrt{2}\sqrt{2}Y_1^{-1}) \rangle = \tfrac{1}{4}\hbar(2-2) = 0 \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\langle L_x \rangle_\Psi = \frac{1}{2} \left[\langle \Psi | L_+ | \Psi \rangle + \langle \Psi | L_- | \Psi \rangle \right] = 0 \;\; \checkmark$$

Apartado (b)

Tenemos una partícula de espín $s = 1/2$ en el estado

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left[\sqrt{3} \, |\Psi_{xz}\rangle \otimes |+\rangle - |\Psi_{zy}\rangle \otimes |-\rangle \right] \in \mathcal{H}^{\text{orb}} \otimes \mathcal{H}^{\text{spin}}$$

Nos piden hallar en la posición $(2,1,1)$ las probabilidades de obtener $+\hbar/2$ y $-\hbar/2$ al medir S_z, es decir, $\mathcal{P}(+\hbar/2)$ y $\mathcal{P}(-\hbar/2)$ en $(2,1,1)$. Vemos que el estado $|\Psi\rangle$ no es separable, pues tenemos una suma de productos tensoriales y por tanto, la posición que nos dicen será relevante. Así, primero medimos los estados de los que está compuesto $|\Psi\rangle$ en la posición dada,

$$\langle (2,1,1) | \Psi_{xz} \rangle = n_1(2-1)e^{-(4+1+1)} = n_1 e^{-6}$$

$$\langle (2,1,1) | \Psi_{yz} \rangle = n_2(1-1)e^{-6} = 0$$

Por tanto, las constantes de normalización quedan como $n_1 = e^{-6}$ y $n_2 = 0$. Ahora normalizamos el estado en la posición que nos han dado, $|\Psi(2,1,1)\rangle = A\frac{\sqrt{3}}{2} |\Psi_{xz}\rangle \otimes |+\rangle$,

$$1 = |\langle \Psi | \Psi \rangle|^2 = \frac{3}{4}A^2 \Longrightarrow A = \frac{2}{\sqrt{3}}$$

Así queda que,

$$\mathcal{P}(+\hbar/2) = |\langle + | \Psi(2,1,1) \rangle|^2 = \frac{3}{4}\frac{4}{3} = 1 \;\; \checkmark$$

$$\mathcal{P}(-\hbar/2) = |\langle - | \Psi(2,1,1) \rangle|^2 = 0 \;\; \checkmark$$