Mecánica Cuántica. Tarea 07[*][†]

José Emmanuel Flores Calderón

Fecha: 19/05/2021.

1. Partiendo de que $Y_l^m(\theta,\phi) = \langle \theta,\phi|l,m\rangle$ muestre que la forma general de los armonicos esféricos esta dada por
$$Y_{jm} = (-1)^m \left(\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}\right)^{\frac{1}{2}} P_j^m(\cos\theta)\exp(im\phi),$$
donde
$$P_m^j(u) = (-1)^{j+m}\frac{(j+m)!}{(j-m)!}\frac{\left(1-u^2\right)^{-\frac{m}{2}}}{2^j j!}\left(\frac{d}{du}\right)^{j-m}\left(1-u^2\right),$$
son los polinomios asociados de Legendre.

Solución.

Sabemos que la siguiente relación se cumple
$$\langle r,\theta,\phi|L_z|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle r,\theta,\phi|\Phi\rangle,$$
si ahora escogemos a $|\Phi\rangle = |l,m\rangle$, tenemos que
$$\langle r,\theta,\phi|L_z|l,m\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle r,\theta,\phi|l,m\rangle,$$
pero $L_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$, entonces
$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle r,\theta,\phi|l,m\rangle = m\hbar\langle r,\theta,\phi|l,m\rangle.$$
La ecuación diferencial anterior implica una dependencia en las eigenfunciones de la forma $\exp(im\phi)$. Por otra parte, calculemos
$$L_+|l,l\rangle = 0,$$
donde $L_\pm = L_x \pm iL_y$. Ahora bien, sabemos que
$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} \to \mathbf{r}\times\frac{\hbar}{i}\nabla,$$
y haciendo el cambio a coordenadas esféricas, tenemos que
$$\mathbf{L} \to r\mathbf{u}_r \times \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{u}_r\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{u}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathbf{u}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{u}_r\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{u}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right).$$
Si ahora, tomamos las componentes x y y vectores unitarios anteriores, tenemos que
$$L_x \to \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),$$

[*] Grupo C011 | Trimestre 21-1
[†] Profesor: Miguel Angel Bastarrachea Magnani | Ayudante: Yoshua Chávez Bolaños

$$L_y \to \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right).$$

Con lo cual, tenemos

$$L_\pm \to \frac{\hbar}{i}\exp\left(\pm i\phi\right)\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right).$$

De manera que si calculamos $\langle\theta,\phi|L_+|l,l\rangle$ se tiene

$$\langle\theta,\phi|L_+|l,l\rangle = \frac{\hbar}{i}\exp\left(i\phi\right)\left(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\theta,\phi|l,l\rangle = 0.$$

Si ahora insertamos la dependencia que conocida $\exp\left(il\phi\right)$, obtenemos la ecuación diferencial

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - l\cot\theta\right)\langle\theta,\phi|l,l\rangle = 0,$$

cuya solución esta dada por

$$\langle\theta,\phi|l,l\rangle = c_l\exp\left(il\phi\right)\sin^l\theta.$$

Usando la siguiente condición de normalización

$$\int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\phi\left|Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right)\right|^2 = 1,$$

tenemos que

$$\langle\theta,\phi|l,l\rangle = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\exp\left(il\phi\right)\sin^l\theta.$$

Apliquemos ahora el operador de descenso, el cual sabemos que cumple con

$$L_-|l,m\rangle = \sqrt{l\left(l+1\right) - m\left(m-1\right)}\hbar|l,m-1\rangle.$$

Si ahora combinamos los últimos dos resultados, tenemos que

$$Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{\left(2l+1\right)\left(l+m\right)!}{4\pi\left(l-m\right)!}}\exp\left(im\phi\right)\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{d\left(\cos\theta\right)^{l-m}}\sin^{2l}\theta.$$

2. Considera una partícula sin espín ligada a un centro fijo por un potencial de fuerza central.

   (a) Relaciona, tanto como sea posible, las matrices de elementos

   $$\langle n',m',l'| \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+iy\right)|n,l,m\rangle \quad \& \quad \langle n',m',l'|z|n,l,m\rangle$$

   usando sólo el teorema de Wigner-Eckart. Asegúrate de establecer bajo qué condiciones la matriz de elementos es no nula.

   (b) Haz el mismo problema usando la función de onda $\psi\left(\mathbf{x}\right) = R_{nl}\left(r\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right)$. Donde asumimos que la función de onda $\psi_{nlm}\left(\mathbf{x}\right) = \langle\mathbf{x}|n,l,m\rangle = R_{nl}\left(r\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right)$ es separable, donde $R_{nl}\left(r\right)$ es la función radial y n el número cuántico radial.

Solución.

(a) Para los tensores esféricos, tenemos que

$$\mp\frac{\left(x+iy\right)}{\sqrt{2}} = T_{\pm1}^{(1)} \quad \& \quad z = T_0^{(1)}.$$

Ahora bien, por el teorema de Wigner-Eckart, tenemos que

$$\langle n'l'm'|T_q^{(1)}|nlm\rangle = \langle l1; mq|l1; l'm'\rangle \frac{\langle n'l'|T^{(1)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}},$$

donde toda la dependencia de m, m' y q esta contenida en los coeficientes de Clebsch-Gordan, así que tenemos las dos relaciones siguientes

$$\langle n'l'm'|T_{\pm 1}^{(1)}|nlm\rangle = \langle l1; m, \pm 1|l1; l'm'\rangle \frac{\langle n'l'|T^{(1)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}},$$

$$\langle n'l'm'|T_0^{(1)}|nlm\rangle = \langle l1; m, 0|l1; l'm'\rangle \frac{\langle n'l'|T^{(1)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}$$

de manera que

$$\frac{\langle n'l'm'|T_q^{(1)}|nlm\rangle}{\langle n'l'm'|T_0^{(1)}|nlm\rangle} = \frac{\langle l1; m, \pm 1|l1; l'm'\rangle \frac{\langle n'l'|T^{(1)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}}{\langle l1; m, 0|l1; l'm'\rangle \frac{\langle n'l'|T^{(1)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}} = \frac{\langle l1; m, \pm 1|l1; l'm'\rangle}{\langle l1; m0,|l1; l'm'\rangle},$$

o bien

$$\frac{\langle n'l'm'|T_q^{(1)}|nlm\rangle}{\langle n'l'm'|T_0^{(1)}|nlm\rangle} = \frac{\langle l1; m, \pm 1|l1; l'm'\rangle}{\langle l1; m0,|l1; l'm'\rangle}.$$

Todos los elementos de matriz $\langle n'l'm'|T_q^{(1)}|nlm\rangle$ son cero (para los tres casos ± 1 y 0), a menos que $m' = m + q$ y además que se cumpla $|l-1| \leq l' \leq l+1$.

3. Utiliza el teorema de Wigner-Eckart para encontrar el valor de la integral

$$\int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi)\, Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi)\, Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi).$$

Solución.
Sabemos que

$$\mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_l^{m*}(\theta, \phi)\, |_{\theta=\beta, \phi=\alpha}.$$

Por otra parte, se cumple que

$$\mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R)\, \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) = \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \times \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm'\rangle \mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(R).$$

Si ahora, hacemos $j_1 = l_1$, $j_2 = l_2$, $m_1' \to 0$ y $m_2' \to 0$, es decir $m \to 0$, tenemos

$$\mathcal{D}_{m_1 0}^{(l_1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_{l_1}^{m_1 *}(\theta, \phi),$$

junto con

$$\mathcal{D}_{m_2 0}^{(l_2)} = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_{l_2}^{m_2 *}(\theta, \phi).$$

Por otra parte, tenemos que

$$\mathcal{D}_{m_1 0}^{(l_1)}(R)\, \mathcal{D}_{m_2 0}^{(l_2)}(R) = \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l'm'\rangle \times \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l'0\rangle \mathcal{D}_{m'0}^{(l')}(R),$$

pero

$$\mathcal{D}_{m'0}^{(l')}\left(R\right)=\sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}}Y_{l'}^{m'*}\left(\theta,\phi\right),$$

con lo cual, tenemos que

$$\sqrt{\frac{4\pi}{(2l_1+1)}}Y_{l_1}^{m_1*}\left(\theta,\phi\right)\sqrt{\frac{4\pi}{(2l_2+1)}}Y_{l_2}^{m_2*}\left(\theta,\phi\right)=\sum_{l'}\sum_{m'}\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;l'm'\rangle$$

$$\times\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l'0\rangle\sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}}Y_{l'}^{m'*}\left(\theta,\phi\right),$$

con lo cual, tenemos que

$$Y_{l_1}^{m_1*}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_2}^{m_2*}\left(\theta,\phi\right)=\sqrt{\frac{(2l_1+1)\left(2l_2+1\right)}{(2l'+1)}}\sum_{l'}\sum_{m'}\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;l'm'\rangle\times\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l'0\rangle Y_{l'}^{m'*}\left(\theta,\phi\right),$$

o bien, si tomamos el complejo conjugado de la expresión anterior, tenemos que

$$Y_{l_1}^{m_1}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\theta,\phi\right)=\sqrt{\frac{(2l_1+1)\left(2l_2+1\right)}{4\pi\left(2l'+1\right)}}\sum_{l'}\sum_{m'}\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;l'm'\rangle\times\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l'0\rangle Y_{l'}^{m'}\left(\theta,\phi\right).$$

Si ahora, multiplicamos la expresión anterior por $Y_l^{m*}\left(\theta,\phi\right)$ e integramos sobre ángulos sólidos, tenemos que

$$\int d\Omega Y_l^{m*}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_1}^{m_1}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\theta,\phi\right)=\int d\Omega\sqrt{\frac{(2l_1+1)\left(2l_2+1\right)}{4\pi\left(2l'+1\right)}}\sum_{l'}\sum_{m'}\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;l'm'\rangle$$

$$\times\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l'0\rangle Y_l^{m*}\left(\theta,\phi\right)Y_{l'}^{m'}\left(\theta,\phi\right).$$

Usando las propiedades de ortogonalidad de los armonicos esféricos, tenemos que el lado derecho de la ecuación anteior, se convierte en

$$\sqrt{\frac{(2l_1+1)\left(2l_2+1\right)}{4\pi\left(2l+1\right)}}\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l0\rangle\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;lm\rangle,$$

por lo tanto, tenemos que

$$\int d\Omega Y_l^{m*}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_1}^{m_1}\left(\theta,\phi\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\theta,\phi\right)=\sqrt{\frac{(2l_1+1)\left(2l_2+1\right)}{4\pi\left(2l+1\right)}}\langle l_1l_2;00|l_1l_2;l0\rangle\langle l_1l_2;m_1m_2|l_1l_2;lm\rangle.$$

4. Dos partículas tienen momentos angulares $l=1$ y $l_2=2$. Obtener explícitamente los coe- ficientes del desarrollo del estado $|l_1,l_2;L=1,M=1\rangle$ como combinación lineal de los estados $|l_1,m_1\rangle|l_2,m_2\rangle$.

   Solución.

5. Un núcleo de espín $3/2$ situado en el origen está sujeto a un campo eléctrio inhomogeneo externo. La interacción de cuadrupolo eléctrico básica pueden ser tomada como

$$H_{int}=\frac{eQ}{2s\left(s-1\right)\hbar^2}\left[\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0S_x^2+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0S_y^2+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0S_z^2\right],$$

   donde ϕ es un potencial electrostático que satisface la ecuación de Laplace y los ejes coordenas son tales que

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\right)_0=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial z}\right)_0=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial z}\right)_0=0.$$

Muestra que la energía de interacción puede ser escrita como

$$A\left(3S_z^2-\mathbf{S}^2\right)+B\left(S_x^2-S_y^2\right)+B\left(S_+^2+S_-^2\right),$$

y expresa A y B en términos de $\left(\partial^2\phi/\partial x^2\right)_0$ y así sucesivamente. Determine los eigenkets de energía (en términos de $|m\rangle$, donde $m=\pm 3/2, \pm 1/2$) y sus correspondientes eigenvalores. ¿Existe alguna degeneración?

Solución.

Hagamos los siguientes cambios de notación

$$\alpha=\frac{eQ}{2s\left(s-1\right)\hbar^2},\ \ \phi_{xx}=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0,\ \ \phi_{yy}=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0,\ \ \phi_{zz}=\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0.$$

Entonces el Hamiltoniano de interacción, se escribe como

$$H_{int}=\alpha\left[\phi_{xx}S_x^2+\phi_{yy}S_y^2+\phi_{zz}S_z^2\right].$$

Por otra parte, sabemos que ϕ satisface la ecuación de Laplace, esto es

$$\nabla^2\phi=0 \iff \phi_{xx}+\phi_{yy}+\phi_{zz}=0 \implies \phi_{xx}+\phi_{yy}=-\phi_{zz},$$

y que los operadores S_+ ,S_- y $\mathbf{S}^2$ están dados por

$$S_+=S_x+iS_y\ \ ,\ \ S_-=S_x-iS_y\ \ \&\ \ \mathbf{S}^2=S_x^2+S_y^2+S_z^2$$

de manera que

$$S_+^2+S_-^2=\left(S_x+iS_y\right)^2+\left(S_x-iS_y\right)^2=2\left(S_x^2-S_y^2\right).$$

Por lo tanto, queremos escribir a H_{int} de la siguiente forma

$$H_{int}=A\left(3S_z^2-\mathbf{S}^2\right)+B\left(S_x^2-S_y^2\right)+2B\left(S_x^2-S_y^2\right),$$

$$\implies H_{int}=A\left(2S_z^2-S_x^2-S_y^2\right)+3B\left(S_x^2-S_y^2\right),$$

$$\implies H_{int}=2AS_z^2+\left(3B-A\right)S_x^2+\left(-3B-A\right)S_y^2$$

Si lo comparamos con el Hamiltoniano original, obtenemos las relaciones

$$A=\frac{\alpha}{2}\phi_{zz}=-\frac{\alpha}{2}\left(\phi_{xx}+\phi_{yy}\right),$$

$$B=\frac{\alpha}{6}\left(\phi_{xx}-\phi_{yy}\right).$$

Ahora bien, apliquemos $3S_z^2-\mathbf{S}^2$ y $S_\pm^2$ al ket $|m\rangle$

$$\left(3S_z^2-\mathbf{S}^2\right)|m\rangle=3S_z^2|m\rangle-\mathbf{S}^2|m\rangle=\left(3m^2\hbar^2-\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\hbar^2\right)|m\rangle,$$

$$\implies \left(3S_z^2-\mathbf{S}^2\right)|m\rangle=\hbar^2\left(3m^2-\frac{15}{4}\right)|m\rangle.$$

Ahora bien, apliquemos $S_\pm^2$ al ket $|m\rangle$

$$S_+^2|m\rangle=S_+\left(S_+|m\rangle\right)=S_+\left(\sqrt{\left(s-m\right)\left(s+m+1\right)}\hbar|m+1\rangle\right)$$

$$\implies S_+^2|m\rangle=\hbar^2\sqrt{\left(s-m-1\right)\left(s+m+1\right)\left(s-m\right)\left(s+m+1\right)}|m+2\rangle,$$

mientras que para S_-^2, tenemos

$$S_-^2|m\rangle = S_-\left(S_-|m\rangle\right) = S_-\left(\sqrt{(s+m)\,(s-m+1)}\hbar|m-1\rangle\right),$$

$$\implies S_-^2|m\rangle = \hbar^2\sqrt{(s+m-1)\,(s-m+2)\,(s+m)\,(s-m+1)}|m-2\rangle.$$

Si ahora etiquetamos a los estados base como $m = \left\{+\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\}$, obtenemos que la representación matricial del operador Hamiltoniano es

$$H = \begin{pmatrix} 3A & 2B\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 2B\sqrt{3} & -3A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3A & 2B\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2B\sqrt{3} & -3A \end{pmatrix}.$$

La matriz anterior es diagonal por bloques de 2x2, de manera que hay una degeneración doble en todos los eigenvalores. Para los bloques de matrices es sencillo encontrar los eigenvalores, basta con ressolver el problema de eigenvalores

$$\det\begin{pmatrix} 3A-\lambda & 2B\sqrt{3} \\ 2B\sqrt{3} & -3A-\lambda \end{pmatrix} = 0 \iff -\left(3A-\lambda\right)\left(3A+\lambda\right) - 12B^2 = 0,$$

$$\iff -9A^2 + \lambda^2 - 12B^2 = 0 \implies \lambda_\pm = \pm\sqrt{9A^2+12B^2}.$$

Y los vectores propios, sin diagonalizar, quedan escritos como

$$|\lambda_\pm\rangle = 2\sqrt{3}B\left|\pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle + \left(\lambda_\pm \pm 3A\right)\left|\mp\frac{3}{2}, \mp\frac{1}{2}\right\rangle.$$