Universidad Nacional de Trujillo

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas

Departamento Acádemico de Física

1

Problemas Resueltos de Mecánica Cuántica

Kelvin J. Ramos Villalobos

The Dirac Equation

"Physical laws should have mathematical beauty"
Paul A. M. Dirac

Índice general

1

El Oscilador Armónico

1.1. Un Breve tratamiento teórico

El hamiltoniano de un Oscilador Armónico, el cual consiste de una partícula de masa m que oscila con frecuencia angular ω bajo la influencia de un potencial armónico unidimensional, es

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \tag{1.1}$$

Y debido a que podemos realizar mediciones de momento y posición de la partícula de masa m (sujetos al principio de incertidumbre de Heinsenberg), los operadores $\hat{p}$ y $\hat{x}$ son hermitianos.
Existen dos métodos para resolver el problema del oscilador armónico: El algebraico y el analítico. A continuación se tratará de una manera sencilla y breve estos dos métodos. Para un entendimiento profundo sugiero revisar todos los libros citados en las referencias.

Método Algebraico

Para resolver el problema del oscilador armónico mediante un tratamiento algebraico[1] se hace necesario definir dos nuevos operadores como una combinación lineal[2] de $\hat{x}$ y $\hat{p}$, [5, pág.109] esto es:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \qquad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{1.2}$$

Claramente podemos darnos cuenta que estos operadores son complejos, no hermitianos y, debido a la forma de los coeficientes de $\hat{x}$ y $\hat{p}$, son adimensionales.

[1]Por tratamiento algebraico entiéndase a transformar el hamiltoniano del O.A en algo más simple de modo que la solución de Schrödinger independiente del tiempo se reduzca a un problema de eigen-valores de un nuevo operador.

[2]En principio, tal como se hace en [6, pág.289], estos operadores se expresan como: $\hat{a} = c_1\hat{x}+c_2\hat{p}$ y $\hat{a}^+ = c_1^*\hat{x} + c_2^*\hat{p}$ con $c_1, c_2 \in \mathrm{C}$

Haciendo uso de la relación de conmutación $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, es fácil encontrar

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}$$

de donde se desprende la siguiente expresión para el hamiltoniano

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \tag{1.3}$$

donde al operador hermitiano $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, se le conoce como *operador número o número de ocupación*. En consecuencia, el problema del O.A se ha reducido a un problema de eigenvalores del *operador número*.
A partir de **(1.2)** se puede obtener $\hat{x}$ y $\hat{p}$ en función de los nuevos operadores, esto es

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \qquad \hat{p} = -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{1.4}$$

Las relaciones de conmutación de los operadores $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ se puede obtener a partir de la definición en **(1.2)**

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left([\hat{x}, \hat{x}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] + \frac{1}{m^2\omega^2} [\hat{p}, \hat{p}] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} (i\hbar) + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \right) \\ &= 1 \end{aligned} \tag{1.5}$$

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}] &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}, \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left([\hat{x}, \hat{x}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] - \frac{1}{m^2\omega^2} [\hat{p}, \hat{p}] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(\frac{i}{m\omega} (i\hbar) + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \right) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.6}$$

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left([\hat{x}, \hat{x}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] - \frac{1}{m^2\omega^2} [\hat{p}, \hat{p}] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} (i\hbar) - \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \right) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.7}$$

Para dar una interpretación física a los nuevos operadores $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ y $\hat{N}$ es necesario obtener relaciones de conmutación, las que se pueden obtener a partir de (**1.5**), (**1.6**), (**1.7**) y (**1.3**)

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{N}] &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \\ &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a} + \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] \\ &= \hat{a} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}[\hat{a}, H] \end{aligned} \tag{1.8}$$

Aquí hemos usado la identidad $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ y en la última parte se ha usado el resultado obtenido al despejar $\hat{N}$ de (**1.3**), esto es

$$\hat{N} = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$$

De manera similar,

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] &= [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \\ &= [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a} + \hat{a}^\dagger[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \\ &= \hat{a}^\dagger(-[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]) \\ &= -\hat{a}^\dagger \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}[\hat{a}^\dagger, H] \end{aligned} \tag{1.9}$$

y finalmente

$$\begin{aligned} [H, \hat{N}] &= [\hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}), \hat{N}] \\ &= \hbar\omega[\hat{N}, \hat{N}] + \frac{1}{2}\hbar\omega[I, \hat{N}] \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.10}$$

Aquí hemos usado la *afirmación* de que el operador $\hat{N}$ conmuta consigo mismo y con el operador identidad I. De (**1.10**) podemos concluir que H y $\hat{N}$ tienen eigenestados en común[3], y los denotaremos por $|n\rangle$, esto implica

$$\hat{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle \tag{1.11}$$

donde los eigenvalores de $\hat{N}$ son denotados por n. Una prueba rápida de que estos eigenvalores son no-negativos es analizando el valor esperado

$$\begin{aligned} n &= \langle n|\,\hat{N}\,|n\rangle \\ &= \langle n|\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle \\ &= \|\hat{a}\,|n\rangle\|^2 \end{aligned}$$

[3]De acuerdo a [4, pág.241]: Se asume que estos eigenestados simultáneos son normalizados y son conocidos como *energy eigenstates*.

y como el cuadrado de la norma del estado $\hat{a}\,|n\rangle$ siempre es positivo, entonces n es no-negativo y, es cero si y solo si $\hat{a}\,|n\rangle$ es el vector cero.
Por otro lado,

$$\begin{aligned} H\,|n\rangle &= \hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right)|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle \\ &= E_n\,|n\rangle \end{aligned} \tag{1.12}$$

de donde se desprende una importante relación para la energía asociada al estado $|n\rangle$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{1.13}$$

1.1.1. Operadores de Creación y Aniquilación

Considerando (**1.5**) y (**1.11**) veamos el resultado de la acción del *operador número* sobre el estado $\hat{a}\,|n\rangle$

$$\hat{N}(\hat{a}\,|n\rangle) = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}(\hat{a}\,|n\rangle) \tag{1.14}$$

$$\begin{aligned} &= (-[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}]+\hat{a}\hat{a}^{\dagger})\hat{a}\,|n\rangle \\ &= -\hat{a}\,|n\rangle + \hat{a}\hat{N}\,|n\rangle \\ &= -\hat{a}\,|n\rangle + \hat{a}n\,|n\rangle \\ &= (n-1)\hat{a}\,|n\rangle \end{aligned} \tag{1.15}$$

El resultado es que el estado $\hat{a}\,|n\rangle$ es un eigenestado del *operador número* con eigenvalor $n-1$. Este resultado se puede extender aun más si hacemos uso de relación lineal entre H y $\hat{N}$, dado en (**1.3**), y de (**1.13**), entonces al aplicar el hamiltoniano al estado $\hat{a}\,|n\rangle$ obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} H(\hat{a}\,|n\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right)\hat{a}\,|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left((n-1)+\frac{1}{2}\right)\hat{a}\,|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\hat{a}\,|n\rangle - (\hbar\omega)\hat{a}\,|n\rangle \\ &= \Big(E_n-\hbar\omega\Big)\hat{a}\,|n\rangle \end{aligned} \tag{1.16}$$

De acuerdo a [5, pág. 112]: Si $|n\rangle$ es un *energy eigenstate*, entonces el estado $\hat{a}\,|n\rangle$ es también un eigenestado de H, y la energía asociada a este estado es $E_{n-1} = (E_n - \hbar\omega)$. A partir de esto, podemos darnos cuenta que el efecto del operador a sobre el *energy eigenstate* es disminuir su energía en una unidad de $\hbar\omega$, razón por la cual el operador a es llamado *Operador de bajada* u *Operador de Aniquilación*.

Desde otro punto de vista, si al estado $|n\rangle$ esta asociado la energía E_n, entonces el estado $\hat{a}\,|n\rangle$ con energía E_{n-1} será proporcional al estado (normalizado) $|n-1\rangle$, es decir

$$\hat{a}\,|n\rangle = \alpha_{n-1}\,|n-1\rangle \tag{1.17}$$

de donde

$$\begin{aligned} |\alpha_{n-1}|^2 &= \left\langle n \left| \hat{a}^\dagger \hat{a} \right| n \right\rangle \\ &= \left\langle n \left| \hat{N} \right| n \right\rangle \\ &= n\,\langle n|n\rangle \\ &= n \end{aligned} \tag{1.18}$$

De esto concluimos que n no puede ser negativo. Si asumimos que α_{n-1} es real y considerando (**1.17**), entonces el estado con energía E_{n-1} puede ser escrito como:

$$|n-1\rangle = \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}}\,|n\rangle \tag{1.19}$$

Después de hacer actuar el *Operador número* sobre el estado $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle$ y considerar (**1.9**) se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{N}(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle) &= (-[\hat{a}^\dagger, \hat{N}] + \hat{a}^\dagger \hat{N})\,|n\rangle) \\ &= \hat{a}^\dagger\,|n\rangle + \hat{a}^\dagger \hat{N}\,|n\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger\,|n\rangle + \hat{a}^\dagger n\,|n\rangle \\ &= (n+1)\hat{a}^\dagger\,|n\rangle \end{aligned} \tag{1.20}$$

esto implica que el estado $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle$ es un eigenestado de $\hat{N}$ con eigenvalor $n+1$. Nuevamente, para extender este resultado consideramos la relación entre H y $\hat{N}$ dada en (**1.3**) y la ecuación (**1.13**), por consiguiente

$$\begin{aligned} H(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\hat{a}^\dagger\,|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left((n+1) + \frac{1}{2}\right)\hat{a}\,|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\hat{a}^\dagger\,|n\rangle + (\hbar\omega)\hat{a}^\dagger\,|n\rangle \\ &= \left(E_n + \hbar\omega\right)\hat{a}^\dagger\,|n\rangle \end{aligned} \tag{1.21}$$

De donde nos damos cuenta que el estado $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle$ es un eigenestado de H con valor de energía $E_{n+1} = (E_n + \hbar\omega)$, i.e una energía igual al valor de la energía asociada al *energy eigenstate*, $|n\rangle$, más una unidad de $\hbar\omega$. En conclusión, el efecto del operador $\hat{a}^\dagger$ sobre el *energy eigenstate* es aumentar a su energía asociada una cantidad $\hbar\omega$, razón por la cual este operador es llamado *Operador de subida* u *Operador de Creación*.

De manera similar, si al estado $|n\rangle$ esta asociado la energía E_n, entonces el estado $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ con energía E_{n+1} será proporcional al estado (normalizado) $|n+1\rangle$, es decir

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \beta_{n+1} |n+1\rangle \tag{1.22}$$

Y considerando **(1.5)**, tenemos

$$\begin{aligned} |\beta_{n+1}|^2 &= \langle n |\hat{a}\hat{a}^\dagger| n\rangle \\ &= \left\langle n \middle|([\hat{a},\hat{a}^\dagger]+\hat{N})\middle| n\right\rangle \\ &= \left\langle n \middle|(1+\hat{N})\middle| n\right\rangle \\ &= (n+1)\langle n|n\rangle \\ &= n+1 \end{aligned} \tag{1.23}$$

Asumiendo que β_{n+1} es real y de **(1.22)**, el estado con energía E_{n+1} puede ser escrito como:

$$|n+1\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}} |n\rangle \tag{1.24}$$

De **(1.17)** se sabe que n es positivo y entero; esto implica que debe existir un estado base $\hat{a}\,|n_{min}\rangle$ con la energía más baja y, de acuerdo a **(1.13)**, la energía más baja se da para cuando $n=0$. Por lo tanto,

$$|n_{min}\rangle = |0\rangle \tag{1.25}$$

y la *energía punto cero* del oscilador asociada al estado $|0\rangle$ es:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{1.26}$$

A partir de **(1.25)** y **(1.24)** podemos escribir los *energy eigenstate* $|1\rangle$ y $|2\rangle$ en términos del estado base, esto es

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{1}} |0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{1+1}} |1\rangle \\ &= \left(\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{1+1}}\right)\left(\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{1}} |0\rangle\right) \\ &= \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{\sqrt{(2)(1)}} |0\rangle \end{aligned}$$

En general, un *energy eigenstate* arbitrario $|n\rangle$ es obtenido luego de aplicar el operador $\hat{a}^\dagger$ al estado base n veces. Matemáticamente esto se escribe como:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \tag{1.27}$$

1.1.2. Representación matricial de algunos operadores

Los elementos de matriz del operador de bajada, $\hat{a}$, pueden ser obtenidos a partir de (**1.19**)

$$\begin{aligned} \langle m|\, \hat{a}\, |n\rangle &= \sqrt{n}\, \langle m|n-1\rangle \\ &= \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \end{aligned} \tag{1.28}$$

y de (**1.24**) los elementos de matriz para el operador de subida, $\hat{a}^\dagger$, se expresan como:

$$\begin{aligned} \langle m|\, \hat{a}^\dagger\, |n\rangle &= \sqrt{n+1}\, \langle m|n+1\rangle \\ &= \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \end{aligned} \tag{1.29}$$

Debido a que los operadores de posición y momento vienen expresados como una combinación lineal de los *operadores de escalera*, dado en (**1.4**), podemos construir a partir de (**1.28**) y (**1.29**) sus elementos de matriz. Así, los elementos de matriz de $\hat{x}$ adopta la forma:

$$\begin{aligned} \langle m|\, \hat{x}\, |n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\langle m|\, \hat{a}\, |n\rangle + \langle m|\, \hat{a}^\dagger\, |n\rangle\Big) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\Big) \end{aligned} \tag{1.30}$$

y para $\hat{p}$ tenemos:

$$\begin{aligned} \langle m|\, \hat{x}\, |n\rangle &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\Big(\langle m|\, \hat{a}\, |n\rangle - \langle m|\, \hat{a}^\dagger\, |n\rangle\Big) \\ &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\Big(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\Big) \end{aligned} \tag{1.31}$$

Método Analítico

La función de onda asociada al *energy eigenstate*, $|n\rangle$, es definido como:

$$\psi(x) = \langle x|n\rangle \tag{1.32}$$

donde la norma cuadrada de esta función nos indica la probabilidad de encontrar al oscilador en la posición x con energía E_n.

1.1.3. Solución de la ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el oscilador amónico, en el espacio de las coordenadas, con hamiltoniano dado en (**1.1**) toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.33}$$

Para solucionar esta ecuación se necesita transformarlo a una que sea adimensional. Esto se logra al hacer el cambio de variable $x = \rho\xi$,[4] , donde ρ es una constante con unidades de longitud y la variable ξ es adimensional. Hacer este cambio de variable implica que:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} \longrightarrow \frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\frac{1}{\rho} \tag{1.34}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \longrightarrow \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}\right)\frac{d\xi}{dx} = \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}\frac{1}{\rho^2} \tag{1.35}$$

Teniendo en cuenta (**1.34**) y (**1.35**), la ecuación (**1.33**) en la variable ξ toma la forma adimensional siguiente:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m\rho^2}\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\rho\xi)^2\psi(\xi) &= E\psi(\xi) \\ \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \frac{m^2\omega^2\rho^4}{\hbar^2}\xi^2\psi(\xi) &= -\frac{2mE\rho^2}{\hbar^2}\psi(\xi) \end{aligned} \tag{1.36}$$

Al definir

$$\rho = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{1.37}$$

La ecuación (**1.36**) toma una forma más simple

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = -\epsilon\psi(\xi) \tag{1.38}$$

Antes de resolver esta ecuación diferencial por el método de Frobenius, analizaremos el comportamiento asintótico de la función $\psi(\xi)$. Esto implica analizar el comportamiento de la función $\psi(\xi)$ en la región donde $\xi \to \infty$, lo denotaremos $\psi_{as}(\xi)$. Con seguridad, en tal región, podemos despreciar el término que acompaña a ϵ en la ecuación (**1.38**) para obtener

$$\frac{d^2\psi_{as}(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi_{as}(\xi) = 0 \tag{1.39}$$

Esta ecuación diferencial por ser de 2do orden posee dos soluciones. En Física, un requerimiento de una función solución es que tal función debe manifestar un buen comportamiento en el infinito (no divergente), por ende solo consideraremos la solución cuadrado integrable siguiente:

$$\psi_{as}(\xi) = e^{-\xi^2/2}$$

Por tanto, la solución de la ecuación diferencial (**1.38**), válido para toda región de ξ, podemos escribirlo como:

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{1.40}$$

[4] También se puede hacer el cambio de variable $\xi = a^2x^2$. Para este caso sugiero revisar [8, cáp.5] donde se resuelve la ecuación Schrödinger mediante el análisis de las funciones hipergeométricas confluyentes.

donde $h(\xi)$ es una función que se determinará al solucionar la ecuación diferencial que resulta de sustituir (**1.40**) en (**1.38**). En dirección de esto, veamos la forma de las derivadas

$$\begin{aligned} \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} &= -\xi e^{-\xi^2/2}h(\xi) + e^{-\xi^2/2}\frac{dh(\xi)}{d\xi} \\ \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} &= e^{-\xi^2/2}\left(-h(\xi) + \xi^2 h(\xi) - \xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} - \xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + \frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2}\right) \end{aligned} \tag{1.41}$$

Reemplazando (**1.41**) y (**1.40**) en (**1.38**)

$$\left(\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + \xi^2h(\xi) - h(\xi) - \xi^2h(\xi) + \epsilon h(\xi)\right)e^{-\xi^2/2} = 0$$

y luego de simplificar, se obtiene la **ecuación diferencial de Hermite**

$$\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + (\epsilon - 1)h(\xi) = 0 \tag{1.42}$$

Para solucionar esta ecuación diferencial por el método de Frobenius, asumiremos una expansión en serie para la función $h(\xi)$, esto es

$$h(\xi) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m \tag{1.43}$$

A partir de esto se deriva lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{dh(\xi)}{d\xi} &= \sum_{m=1}^{\infty} m a_m \xi^{m-1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty}(m+1)a_{m+1}\xi^m \qquad (1.44) \\ \frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} &= \sum_{m=1}^{\infty} m(m+1)a_{m+1}\xi^{m-1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty}(m+1)(m+2)a_{m+2}\xi^m \qquad (1.45) \end{aligned}$$

Sustituyendo (**1.43**), (**1.44**) y (**1.45**) en (**1.42**)

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty}(m+1)(m+2)a_{m+2}\xi^m - 2\sum_{m=0}^{\infty}(m+1)a_{m+1}\xi^{m+1} + (\epsilon-1)\sum_{m=0}^{\infty}a_m\xi^m &= 0 \\ \sum_{m=0}^{\infty}\Big((m+1)(m+2)a_{m+2} + (\epsilon-1)a_m\Big)\xi^m - 2\sum_{m=0}^{\infty}(m+1)a_{m+1}\xi^{m+1} &= 0 \end{aligned}$$

Al hacer el cambio de índice $m \to m-1$ en la última sumatoria de la ecuación anterior no alterara el resultado,

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^{\infty}\Big((m+1)(m+2)a_{m+2}+(\epsilon-1)a_m\Big)\xi^m - 2\sum_{m=1}^{\infty} m a_m \xi^m &= 0\\
\sum_{m=0}^{\infty}\Big((m+1)(m+2)a_{m+2}+(\epsilon-1)a_m\Big)\xi^m - 2\sum_{m=0}^{\infty} m a_m \xi^m &= 0\\
\sum_{m=0}^{\infty}\Big((m+1)(m+2)a_{m+2}+(\epsilon-1)a_m - 2m a_m\Big)\xi^m &= 0
\end{aligned}$$

Esta igualdad se satisface si los coeficientes de la sumatoria son igual a cero, es decir:

$$a_{m+2} = \frac{1-\epsilon+2m}{(m+1)(m+2)}a_m, \qquad m \geq 0 \tag{1.46}$$

La ecuación (**1.46**) es conocida como la *relación de recurrencia*(R.R) para la ecuación diferencial de Hermite. La importancia de esta R.R es que todos los coeficientes de la sumatoria en (**1.43**) pueden ser dados en términos de un solo parámetro. Queda claro que con a_0 solo es posible generar coeficientes a_2, a_4, ..., y por ende una *serie par*

$$h^{(+)}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}\xi^{2k} \tag{1.47}$$

y, dado a_1 solo se puede generar a_3, a_5, ..., una *serie impar*.[5]

$$h^{(-)}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1}\xi^{2k+1} \tag{1.48}$$

Luego, a partir de (**1.47**) y (**1.48**), podemos escribir (**1.43**) como una suma de dos series separadas

$$\begin{aligned}
h(\xi) &= h^{(+)}(\xi) + h^{(-)}(\xi)\\
&= \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}\xi^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1}\xi^{2k+1}
\end{aligned} \tag{1.49}$$

De (**1.46**) y (**1.49**) notemos que si a_0=0, todos los coeficientes en la *serie par* se anularan y la función resultante será impar, i.e $h(\xi) = h^{(-)}(\xi)$. Por otro lado, si $a_1 = 0$, luego, todos los coeficiente de la *serie impar* serán cero y la función $h(\xi)$ será par, i.e $h(\xi) = h^{(+)}(\xi)$.

Un criterio muy importante para analizar la convergencia de una serie es *la prueba*

[5]No poder combinar estas dos series en una sola es debido a la invariancia del hamiltoniano ante reflexiones $x \to -x$ ($\xi \to -\xi$) que vienen a ser transformaciones discretas conocida como *Paridad*. El resultado de esto es que $h(\xi)$ se puede clasificar por su paridad. Para un mayor detalle, véase [1, cap.9] y [2, cap.4].

de la razón o *ratio test*.[6] Veamos el comportamiento de la serie (**1.43**), y por ende de la relación de recurrencia (**1.46**), para un m muy grande ($m \to \infty$)[7]

$$\begin{aligned} \frac{a_{m+2}}{a_m} &= \frac{1-\epsilon+2m}{(m+1)(m+2)} \\ &\xrightarrow{m\to\infty} \frac{2m}{(m+1)(m+2)} \\ &\xrightarrow{m\to\infty} 2\frac{m}{(m)(m)} \\ &\xrightarrow{m\to\infty} \frac{2}{m} \end{aligned} \tag{1.50}$$

El resultado dado en (**1.50**) corresponde al comportamiento asintótico de los coeficientes de la serie para la función $e^{\xi^2/2}$ [5, pág.126] . A partir de esto podríamos deducir que $h(\xi) \sim e^{\xi^2/2}$ y al sustituir este resultado en (**1.40**) la solución $\psi(\xi)$ de dejaría de ser cero en el infinito [2, pág.87]. Esto no es compatible con la demanda $lim_{\xi\to\infty}\psi(\xi) = 0$ para toda solución ψ de la ecuación de Schrödinger. Para evitar caer en este problema se hace necesario truncar la serie (**1.49**).
Analicemos esto desde otro punto de vista. Si $h(\xi)$ es una serie infinita de potencias, dada por (**1.43**), luego, para $\xi \to \infty$ ésta serie sería divergente; esto generaría que la función $\psi(\xi) \sim h(\xi)$ sea divergente en el infinito o que deje de ser del cuadrado integrable y finita en todo punto i.e la probabilidad de encontrar a la partícula ($|\psi(\xi)|^2$), que se encuentra bajo un potencial de oscilador armónico, en el infinito sea infinita.

De lo expuesto concluimos que una solución física ψ solo se obtiene si la serie infinita para $h(\xi)$ es truncada, esto implica que la relación de recurrencia termine, i.e para un $n = m$ el denominador de (**1.46**) es igual a cero

$$a_{n+2} = \frac{1-\epsilon+2n}{(n+1)(n+2)}a_n = 0 \tag{1.51}$$

de esto sigue que si $a_1 = 0$, luego, para un *n-par* $h(\xi)$ es un polinomio de orden *n-par* y si $a_0 = 0$, para un *n-impar* $h(\xi)$ es un polinomio de orden *n-impar*. Matemáticamente, esto se puede escribir como:

$$h(\xi) = \begin{cases} a_0 + a_2\xi^2 + ... + a_n\xi^n & \text{si} \quad a_1 = 0, \textit{n-par} \\ \\ a_1 + a_3\xi^3 + ... + a_n\xi^n & \text{si} \quad a_0 = 0, \textit{n-impar} \end{cases}$$

Por otro lado, de (**1.51**) se obtiene

$$\epsilon = 2n + 1 \tag{1.52}$$

[6] Para más detalle véase [9, cap.9]

[7] Para un mejor entendimiento y mayor detalle de esta parte sugiero revisar [9, pág.669],[5, pág.126], [1, pág.245],[7, pág.194].

o, si consideramos la definición en (**1.37**)

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1 \tag{1.53}$$

Esto implica que el sistema tendrá una solución física o aceptable si la energía del oscilador esta dado por la ecuación siguiente:

$$E = \hbar\omega(n + 1/2) \tag{1.54}$$

que es justamente lo se obtuvo mediante el método algebraico.

1.1.4. Polinomios de Hermite

La solución (**1.40**) puede ser escrita como

$$\psi_n(\xi) = h_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{1.55}$$

donde

$$h_n(\xi) = \begin{cases} \sum_{m=0}^{n/2} a_{2m}\xi^{2m} & \text{si} \quad n\text{-}par \\ \\ \sum_{m=0}^{\frac{n-1}{2}} a_{2m+1}\xi^{2m+1} & \text{si} \quad n\text{-}impar \end{cases}$$

con los coeficientes satisfaciendo la relación de recurrencia (**1.46**).
Estos polinomios $h_n(\xi)$, obtenidos debido al truncamiento de la serie (**1.43**), son llamados *Los Polinomios de Hermite* y , con $\epsilon = (2n + 1)$, satisfacen la ecuación diferencial de Hermite (**1.52**) siguiente:

$$\frac{\partial^2 h(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi\frac{\partial h(\xi)}{\partial \xi} + 2nh(\xi) = 0 \tag{1.56}$$

Comúnmente los polinomios de Hermite, $h_n(\xi)$, son denotados por $H_n(\xi)$. De (**1.56**) se pueden derivar algunas de las propiedades que satisfacen son las siguientes:[8]

- Satisfacen la siguiente condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn} \tag{1.57}$$

  donde al factor $e^{-\xi^2}$ se le conoce como la *función peso* o *weight function* y δ_{nm} es la delta de Kronecker.

- Su función generatriz $g(s, \xi)$ es la siguiente:

$$g(s, \xi) = e^{2s\xi - s^2} \tag{1.58}$$

[8] Véase [9, pág.669-674] para más detalles de esta derivación.

esto implica que $H_n(\xi)$ viene dado por:

$$H_n(\xi) = \left.\frac{\partial^n g(\xi, s)}{\partial s^n}\right|_{s=0} \tag{1.59}$$

por lo tanto su formula de Rodrigues es la siguiente

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{1.60}$$

- Satisfacen las relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} &= 2nH_{n-1}(\xi) \\ \xi H_n(\xi) &= nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi) \end{aligned} \tag{1.61}$$

- En la Tabla 1.1 se citan algunos de los primeros polinomios de Hermite.

De (**1.55**) podemos identificar a la función de onda independiente del tiempo, para el oscilador armónico, como:

$$\psi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{1.62}$$

donde A_n viene a ser la constante de normalización y se determinará al normalizar (**1.62**)

Tabla 1.1: Primeros polinomio de Hermite, $H_n(\xi)$

$H_0(\xi)$	$=$	$1,$
$H_1(\xi)$	$=$	$2\xi,$
$H_2(\xi)$	$=$	$4\xi^2 - 2,$
$H_3(\xi)$	$=$	$8\xi^3 - 12\xi,$
$H_4(\xi)$	$=$	$16\xi^4 - 48\xi^2 + 12,$
$H_5(\xi)$	$=$	$32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi,$

1.1.5. Normalización de la Función de Onda

La solución de la ecuación de Schrödinger o funciones propias del oscilador armónico se pueden escribir, con $\xi = ax$ y $a = 1/\rho$ de la manera siguiente:

$$\psi_n(x) = A_n H_n(ax) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \tag{1.63}$$

Para que ésta función esté normalizada se tiene que garantizar

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1 \tag{1.64}$$

Si reemplazamos (**1.63**) en (**1.64**) obtenemos

$$\begin{aligned} \int |A_n|^2 H_n(ax) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} dx &= 1 \\ |A_n|^2 \int H_n(ax) H_n(ax) e^{-a^2x^2} dx &= 1 \end{aligned} \tag{1.65}$$

debido a

$$\xi = ax \Longrightarrow d\xi = adx$$

y al sustituir esto en (**1.65**) se obtiene:

$$|A_n|^2 \frac{1}{a} \int H_n(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1 \tag{1.66}$$

Considerando la condición de ortonormalización de los polinomios de Hermite (**1.57**)

$$\int H_n(\varsigma) H_m(\varsigma) e^{-\varsigma^2} d\varsigma = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}$$

y al aplicarlo en (**1.66**) se obtiene

$$|A_n|^2 \frac{1}{a} \sqrt{\pi} 2^n n! = 1$$

esto implica que la constante de normalización viene dado por:

$$|A_n|^2 = \frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \tag{1.67}$$

Al sustituir (**1.67**) en (**1.63**) se tiene que la función de onda normalizada para un oscilador armónico toma la forma siguiente:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(ax) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \tag{1.68}$$

cuya condición de ortonormalización es

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} \tag{1.69}$$

y satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\xi \psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \tag{1.70}$$

$$\frac{d}{d\xi} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \tag{1.71}$$

1.1.6. Oscilador armónico en 3D

La ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m moviéndose en un potencial de oscilador anisotrópico tridimensional toma la forma siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2+\omega_z^2z^2)\psi(x,y,z)=E_{n_xn_yn_z}\psi(x,y,z) \quad (1.72)$$

donde la energía viene dado por

$$\begin{aligned} E_{n_xn_yn_z} &= E_{n_x}+E_{n_y}+E_{n_z} \\ &= (n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega_x+(n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega_y+(n_z+\frac{1}{2})\hbar\omega_z \end{aligned} \quad (1.73)$$

y los estados estacionarios toman la forma siguiente

$$\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \quad (1.74)$$

donde $\psi_{n_x}(x)$, $\psi_{n_y}(y)$ y $\psi_{n_z}(z)$ son las funciones de onda de un oscilador armónico unidimensional.
Para el caso del oscilador isotrópico ($\omega_x=\omega_y=\omega_z=\omega$), la energía viene dado por

$$E_{n_xn_yn_z}=(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2})\hbar\omega \quad (1.75)$$

y la degeneración para este caso se expresa mediante

$$g_n=\frac{1}{2}(n+1)(n+2) \quad (1.76)$$

con

$$n=n_x+n_y+n_z$$

1.2. Problemas resueltos

1.1. Considere un oscilador armónico 2-dimensional con el potencial

$$V(x,y)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$$

Usando dos conjuntos de operadores de ascenso y descenso, $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ y $\hat{b}$, $\hat{b}^\dagger$, uno para cada coordenada, donde

$$\hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger),\quad \hat{p}_x=\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}i}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$$
$$\hat{y}=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{b}+\hat{b}^\dagger),\quad \hat{p}_y=\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}i}(\hat{b}-\hat{b}^\dagger)$$

(a) Exprese el operador Hamiltoniano y el operador momentum angular, $\hat{L}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x$, en términos de estos operadores.

(b) Aplicar estas propias expresiones para evaluar el conmutador $[\hat{H}, \hat{L}_z]$.

Solución

El Hamiltoniano para el potencial dado toma la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2$$

De la forma dada de $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ y $\hat{y}$, $\hat{p}_y$ se deriva

$$\hat{x}^2 = \frac{1}{2\alpha^2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2, \qquad \hat{p}_x^2 = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2$$
$$\hat{y}^2 = \frac{1}{2\alpha^2}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2, \qquad \hat{p}_y^2 = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2}(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2$$

Luego, al reemplazar en el hamiltoniano se obtiene

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{4m}\left((\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2\right) + \frac{1}{4\alpha^2}m\omega^2\left((\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2\right) \\
&= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{4m}\left(\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{b}\hat{b} - \hat{b}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger\right) \\
&\quad + \frac{1}{4\alpha^2}m\omega^2\left(\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger\right)
\end{aligned}$$

Como los sumandos del Hamiltoniano deben tener la mismas unidades, y teniendo en cuenta que los operadores de escalera son adimensionales, eso implica que:

$$\frac{\alpha^2\hbar^2}{4m} = \frac{m\omega^2}{4\alpha^2}$$

ésto implica que, α viene dado por

$$\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

Al reemplazar α en el hamiltoniano se tiene

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{4}\Big(-\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} - \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger \\
&\quad + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger\Big) \\
&= \frac{\hbar\omega}{4}\left(2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 2\hat{b}\hat{b}^\dagger + 2\hat{b}^\dagger\hat{b}\right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b}\right)
\end{aligned}$$

De (1.5) se tiene que

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$$

Reemplazando esto en el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + 1 + \hat{b}^\dagger\hat{b}\right)$$

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + 1\right)}$$

Este resultado también se puede escribir como:

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}_x + \hat{N}_y + 1)}$$

La componente z del momentum angular $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ expresado en términos de los operadores escalera toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}i}(\hat{b} - \hat{b}^\dagger) - \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \qquad (1.77)\\
&= \frac{\hbar}{2i}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{b} - \hat{b}^\dagger) - \frac{\hbar}{2i}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)\\
&= \frac{\hbar}{2i}\left(\hat{a}\hat{b} - \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b} - \hat{a}^\dagger\hat{b}^\dagger - \hat{b}\hat{a} + \hat{b}\hat{a}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{a}^\dagger\right)\\
&= \frac{\hbar}{2i}\left((\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}) + (\hat{b}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{b}^\dagger) - \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{a}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right)\\
&= \frac{\hbar}{2i}\left([\hat{a}, \hat{b}] + [\hat{b}^\dagger, \hat{a}^\dagger] - \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{a}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right)
\end{aligned}$$

de los conmutadores

$$[\hat{a}, \hat{b}] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{b}^\dagger] = 0$$
$$[\hat{a}, \hat{b}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{b}] = 0$$

Se obtiene

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{2i}(-\hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{a}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a})\\
&= \frac{\hbar}{2i}(2\hat{a}^\dagger\hat{b} - 2\hat{a}\hat{b}^\dagger)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar(\hat{a}^\dagger\hat{b} - \hat{a}\hat{b}^\dagger)}$$

Finalmente, a partir de los resultados encontrados para $\hat{H}$ y $\hat{L}_z$ en términos de los operadores escalera, vamos a calcular el conmutador $[\hat{H}, \hat{L}_z]$.

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{L}_z] &= [\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + 1), -i\hbar(\hat{a}^\dagger\hat{b} - \hat{a}\hat{b}^\dagger)] \\
&= i\hbar^2\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + 1, \hat{a}\hat{b}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{b}] \\
&= i\hbar^2\omega\Big([\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}\hat{b}^\dagger] - [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{b}] + [\hat{b}^\dagger\hat{b}, \hat{a}\hat{b}^\dagger] - [\hat{b}^\dagger\hat{b}, \hat{a}^\dagger\hat{b}]\Big) \\
&= i\hbar^2\omega\Big([\hat{N}_x, \hat{a}\hat{b}^\dagger] - [\hat{N}_x, \hat{a}^\dagger\hat{b}] + [\hat{N}_y, \hat{a}\hat{b}^\dagger] - [\hat{N}_y, \hat{a}^\dagger\hat{b}]\Big)
\end{aligned}$$

Aquí en la parte final se ha considerado la definición $\hat{N}_x = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, $\hat{N}_y = \hat{b}^\dagger\hat{b}$. Haciendo uso de la identidad $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{L}_z] &= i\hbar^2\omega\Big([\hat{N}_x, \hat{a}]\hat{b}^\dagger + \hat{a}[\hat{N}_x, \hat{b}^\dagger] - [\hat{N}_x, \hat{a}^\dagger]\hat{b} - \hat{a}^\dagger[\hat{N}_x, \hat{b}] \\
&\quad + [\hat{N}_y, \hat{a}]\hat{b}^\dagger + \hat{a}[\hat{N}_y, \hat{b}^\dagger] - [\hat{N}_y, \hat{a}^\dagger]\hat{b} - \hat{a}^\dagger[\hat{N}_y, \hat{b}]\Big)
\end{aligned}$$

y como $[\hat{a}, \hat{b}] = 0$, entonces $[\hat{N}_x, \hat{b}^\dagger] = [\hat{N}_x, \hat{b}] = [\hat{N}_y, \hat{a}] = [\hat{N}_y, \hat{a}^\dagger] = 0$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = i\hbar^2\omega\Big([\hat{N}_x, \hat{a}]\hat{b}^\dagger - [\hat{N}_x, \hat{a}^\dagger]\hat{b} + \hat{a}[\hat{N}_y, \hat{b}^\dagger] - \hat{a}^\dagger[\hat{N}_y, \hat{b}]\Big)$$

de las relaciones de conmutación dadas en (**1.8**), (**1.9**) y teniendo en cuenta que:

$$\begin{aligned}
&[\hat{N}_x, \hat{a}] = -[\hat{a}, \hat{N}_x] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}_y, \hat{b}] = -[\hat{b}, \hat{N}_y] = -\hat{b}, \\
&[\hat{N}_x, \hat{a}^\dagger] = -[\hat{a}^\dagger, \hat{N}_x] = \hat{a}^\dagger, \quad [\hat{N}_y, \hat{b}^\dagger] = -[\hat{b}^\dagger, \hat{N}_y] = \hat{b}^\dagger
\end{aligned}$$

entonces el conmutador toma la forma siguiente:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = i\hbar^2\omega\Big(-\hat{a}\hat{b}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b}\Big)$$

De donde podemos darnos cuenta que:

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0}$$

1.2. Una partícula en un potencial de oscilador armónico $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ tiene una función de onda inicial

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x) + \psi_1(x)]$$

donde ψ_0 y ψ_1 son los estados propios en $n = 0$, $n = 1$ normalizados por el O.A.S

(a) Escriba $\psi(x,t)$ y $|\psi(x,t)|^2$ en términos de ψ_0 y ψ_1

(b) Encuentre el valor esperado de x como función del tiempo, i.e $\langle x\rangle = \langle x\rangle_{(t)}$, la amplitud de oscilación en términos de constantes fundamentales y su frecuencia.

Solución

La función de onda independiente del tiempo obtenida por la superposición de funciones $\psi_n(x)$ soluciones de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico es

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n(x)$$

y la dependiente del tiempo

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

donde E es la energía del oscilador y al reemplazar su valor dado en (**1.54**) la función de onda anterior, ésta resulta ser

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-i(n+1/2)\omega t}$$

Al realizar el producto

$$\psi_m^*(x)\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_m^*(x)\psi_n(x)e^{-i(n+1/2)\omega t}$$

e integrar sobre todo el dominio x, [9] éste toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)\psi(x,t)dx &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)\psi_n(x)e^{-i(n+1/2)\omega t}dx\\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+1/2)\omega t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx\end{aligned}$$

Usando la condición de ortonormalización de las funciones de onda dada en (**1.69**) el producto anterior resulta ser

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)\psi(x,t)dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+1/2)\omega t}\delta_{mn}$$

[9] Teniendo en cuenta que la serie converge uniforme y absolutamente en todo este dominio

La *función delta* hace que de todos los términos sumandos solo sobreviva el término para el cuál $n = m$, así que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi(x,t)dx = c_m e^{-i(n+1/2)\omega t}$$

de esto se deriva (m→ n)

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi(x,t)dx e^{i(n+1/2)\omega t}$$

Al evaluar en $t = 0$ y reemplazar la expresión para la función $\psi(x,0)$, los coeficientes toman la forma siguiente:

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi(x,0)dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)[\psi_0(x)+\psi_1(x)]dx \end{aligned}$$

teniendo en cuenta (**1.68**)

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax)[\psi_0(x)+\psi_1(x)]dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} H_n(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}\psi_0(x)dx + \int_{-\infty}^{\infty} H_n(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}\psi_1(x)dx\right) \end{aligned}$$

Por otro lado, de (**1.68**) también podemos obtener

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^0 0!}} H_0(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \\ \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^1 1!}} H_1(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \end{aligned}$$

sustituyendo ésto en la ecuación para los coeficientes se obtiene:

$$\begin{aligned} c_n = \; & \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} H_n(ax)H_0(ax)e^{-a^2x^2}dx\right. \\ & \left. +\frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{\infty} H_n(ax)H_1(ax)e^{-a^2x^2}dx\right) \end{aligned}$$

Al hacer el cambio de variable $\xi = ax$ ($d\xi = adx$), la expresión anterior resulta

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\left(\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_0(\xi)e^{-\xi^2}d\xi + \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_1(\xi)e^{-\xi^2}d\xi\right)$$

Para resolver ésto hacemos uso de la *Condición de ortonormalización de los Polinomios de Hermite* dado en (**1.57**)

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\left(\sqrt{\pi}2^n n!\delta_{n0} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}2^n n!\delta_{n1}\right)$$

de esto, para $n = 0$ tenemos

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^0 0!}}\left(\sqrt{\pi}2^0 0!\delta_{00} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}2^0 0!\delta_{01}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

y para $n = 1$

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^1 1!}}\left(\sqrt{\pi}2^1 1!\delta_{10} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}2^1 1!\delta_{11}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Encontrado los coeficientes, la función de onda (dependiente del tiempo) toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-i(n+1/2)\omega t} \\ &= c_0\psi_0(x)e^{-i(1/2)\omega t} + c_1\psi_1(x)e^{-i(3/2)\omega t} \end{aligned}$$

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_0(x)e^{-i(1/2)\omega t} + \psi_1(x)e^{-i(3/2)\omega t}\right)}$$

Siguiendo con las partes pedidas, sabemos que la norma cuadrada de la función de onda es dada por:

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

y dado que ya conocemos la función $\psi(x,t)$, entonces

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\left(\psi_0^*(x)e^{i(1/2)\omega t} + \psi_1^*(x)e^{i(3/2)\omega t}\right)\left(\psi_0(x)e^{-i(1/2)\omega t} + \psi_1(x)e^{-i(3/2)\omega t}\right)$$

$$\boxed{|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\left(|\psi_0(x)|^2 + |\psi_1(x)|^2 + \psi_0^*(x)\psi_1(x)e^{-i\omega t} + \psi_1^*(x)\psi_0(x)e^{i\omega t}\right)}$$

Para el valor esperado de x tenemos que:

$$\begin{aligned} \langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx \\ &= \frac{1}{2}\int\left(\psi_0^*(x)x\psi_0(x) + \psi_1^*(x)x\psi_1(x) + e^{-i\omega t}\psi_0^*(x)x\psi_1(x) + e^{i\omega t}\psi_1^*(x)x\psi_0(x)\right)dx \end{aligned}$$

de la relación de recurrencia (1.70)

$$ax\psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)$$

para $n=0$ y $n=1$ se tiene

$$ax\psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(x), \qquad ax\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x) + \psi_2(x)$$

Al sustituir en la expresión para el valor esperado de x, ésta toma la forma:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \frac{1}{2a}\Big(\int \psi_0^*(x)(\sqrt{\frac{1}{2}})\psi_1(x) + \int \psi_1^*(x)(\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x)+\psi_2(x))dx \\ &+e^{-i\omega t}\int \psi_0^*(x)(\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x)+\psi_2(x))dx + e^{i\omega t}\int \psi_1^*(x)\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(x)dx\Big)\end{aligned}$$

usando la condición de ortonormalización de las funciones de onda (**1.69**)

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \frac{1}{2a}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\delta_{01} + \sqrt{\frac{1}{2}}\delta_{10} + \delta_{12} + \sqrt{\frac{1}{2}}e^{-i\omega t}\delta_{00} + \delta_{02} + \sqrt{\frac{1}{2}}e^{i\omega t}\delta_{11}\right) \\ &= \frac{1}{2a}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}e^{-i\omega t} + \sqrt{\frac{1}{2}}e^{i\omega t}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}a}\left(\frac{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}}{2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}a}cos(\omega t)\end{aligned}$$

de la definición de $a = 1/\rho$

$$a^4 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

El valor esperado de x viene a ser

$$\boxed{\langle x\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}cos(\omega t)}$$

1.3. Una función de estado de oscilador armónico cuántico isotrópico en coordenadas esféricas se expresa mediante

$$\psi(r,\theta,\varphi) = A\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\frac{2(arsen\theta cos\varphi)^2-1}{\sqrt{2}}\right)(arsen\theta sen\varphi)e^{-\frac{1}{2}a^2r^2}$$

(a) Calcular la constante de normalización.

(b) Determinar la energía del sistema.

(c) Calcular la degeneración del sistema

Solución

Las coordenadas x,y,z en coordenadas esféricas vienen expresadas como:

$$x = rsen\theta cos\varphi, \quad y = rsen\theta sen\varphi, \quad z = rcos\theta$$

por tanto, la función de onda en las coordenadas cartesianas toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned}
\psi(x,y,z) &= A\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\frac{2(ax)^2-1}{\sqrt{2}}\right)(ay)e^{-\frac{1}{2}a^2(x^2+y^2+z^2)} \\
&= A\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\frac{4(ax)^2-2}{2\sqrt{2}}\right)\frac{2ay}{2}e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}e^{-\frac{1}{2}a^2y^2}e^{-\frac{1}{2}a^2z^2}
\end{aligned}$$

Considerando los polinomios listados en la Tabla 1.1 y $\xi = ax$ (o también $\xi = ay$, $\xi = az$) la función de onda anterior se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
\psi(x,y,z) &= A\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\frac{H_2(ax)}{2\sqrt{2}}\right)\frac{H_1(ay)}{2}H_0(az)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}e^{-\frac{1}{2}a^2y^2}e^{-\frac{1}{2}a^2z^2} \\
&= A\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\frac{H_2(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}}{2\sqrt{2}}\right)\frac{H_1(ay)}{2}e^{-\frac{1}{2}a^2y^2}H_0(az)e^{-\frac{1}{2}a^2z^2}
\end{aligned}$$

Por otra parte, de expresión para la función de onda normalizada, dada en (**1.68**), se tiene que

$$\begin{aligned}
\psi_0(z) &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^0 0!}}H_0(az)e^{-\frac{1}{2}a^2z^2} \\
&= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}H_0(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2z^2} \\
\psi_1(y) &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^1 1!}}H_0(ay)e^{-\frac{1}{2}a^2y^2} \\
&= \sqrt{\frac{a}{2\sqrt{\pi}}}H_1(ay)e^{-\frac{1}{2}a^2y^2} \\
\psi_2(x) &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^2 2!}}H_2(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \\
&= \sqrt{\frac{a}{8\sqrt{\pi}}}H_2(ax)e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}
\end{aligned}$$

Identificando y sustituyendo $\psi_0(az)$, $\psi_1(ay)$, $\psi_2(ax)$ en $\psi(x,y,z)$

$$\begin{aligned}
\psi(x,y,z) &= \frac{A}{4\sqrt{2}}\sqrt{(\frac{a}{\sqrt{\pi}})^3}\left(\sqrt{\frac{8\sqrt{\pi}}{a}}\psi_2(x)\right)\left(\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\psi_1(y)\right)\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\psi_0(z)\right) \\
&= \frac{A}{\sqrt{2}}\pi^{-3/4}\psi_2(x)\psi_1(y)\psi_0(z)
\end{aligned}$$

Finalmente, de la condición de normalización para la función $\psi(x,y,z)$

$$\int |\psi(x,y,z)|^2 dxdydz = 1$$

$$\frac{|A|^2}{2}\pi^{-3/2}\int |\psi_2(x)|^2|\psi_1(y)|^2|\psi_0(z)|^2 dxdydz = 1$$

y teniendo en cuenta que las funciones propias $\psi_2(x)$, $\psi_1(y)$, $\psi_0(z)$ están normalizadas, se encuentra que la constante de normalización es:

$$\boxed{A = \sqrt[4]{4\pi^3}}$$

La energía para un oscilador isotrópico cuya función de onda

$$\psi(x,y,z) = \psi_2(x)\psi_1(y)\psi_0(z)$$

y de acuerdo a **(1.75)**, con $n_x = 2$, $n_y = 1$ y $n_z = 0$, es dado por

$$E_{2,1,0} = (2+1+0+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\boxed{E_{2,1,0} = \frac{7}{2}\hbar\omega}$$

Finalmente, la degeneración del sistema dado en **(1.76)** con $n = 2+1+0 = 3$,

$$g_3 = \frac{1}{2}(3+1)(3+2)$$

$$\boxed{g_3 = 10}$$

La interpretación de esto se muestra en la Tabla 1.2

Tabla 1.2: Degeneración para el oscilador isotrópico

n	ψ_{n_x,n_y,n_z}	degeneración (g_n)
3	$\psi_{3,0,0}$, $\psi_{0,3,0}$, $\psi_{0,0,3}$ $\psi_{2,1,0}$, $\psi_{2,0,1}$, $\psi_{0,2,1}$ $\psi_{1,2,0}$, $\psi_{1,0,2}$, $\psi_{0,1,2}$ $\psi_{1,1,1}$	10

1.4. Considere a una partícula de carga $\mathbf{q} > 0$ en un potencial de oscilador armónico isotrópico tridimensional que soporta la acción de un campo eléctrico constante $E' = (E_x, 0, 0)$. Determine las funciones propias y los valores propios de la energía de está partícula.[10]

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2) - qE'x$$

[10] Éste ejercicio también se puede resolver mediante la teoría de perturbaciones. Véase más abajo el ejercicio **1.4.***

Solución

Dado la forma del potencial, su correspondiente hamiltoniano toma la forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) - qE'x$$

en consecuencia la ecuación de Schrödinger viene a ser:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) - qE'x\right)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

donde, $\psi(x, y, z)$ es la función de onda de la partícula y E es su energía.
Para solucionar esta EDP hacemos uso del método de *separación de variables*, esto es: $\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$[11], en consecuencia,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(gh\frac{d^2 f}{dx^2} + fh\frac{d^2 g}{dy^2} + fg\frac{d^2 h}{dz^2}) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)fgh - qE'xfgh = Efgh$$

esto también puede ser escrito como

$$gh\frac{d^2 f}{dx^2} + fh\frac{d^2 g}{dy^2} + fg\frac{d^2 h}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x^2 + y^2 + z^2)fgh + \frac{2m}{\hbar^2}qE'xfgh = \frac{-2mE}{\hbar^2}fgh$$

Si dividimos por fgh obtenemos:

$$\frac{1}{f}\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{g}\frac{d^2 g}{dy^2} + \frac{1}{h}\frac{d^2 h}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{2m}{\hbar^2}qE'x = -k^2$$

Aquí, con la intensión de simplificar el problema hemos introducido la constante k, que no es otra cosa que:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

La ecuación diferencial anterior, en forma más ordenada viene a ser:

$$\frac{1}{f}\frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}qE'x + \frac{1}{g}\frac{d^2 g}{dy^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}y^2 + \frac{1}{h}\frac{d^2 h}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}z^2 = -k^2$$

Notamos aquí que mediante el método de *separación de variables* hemos convertido una EDP en 3-EDOs, debemos recordar que esta igualdad se garantiza, si y solamente si cada EDO es una constante. Por tanto, podemos escribir

$$\frac{1}{h}\frac{d^2 h}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}z^2 = -k_3^2$$

donde:

$$k_3^2 = k^2 + \frac{1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}qE'x + \frac{1}{g}\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}y^2$$

[11] Por simplicidad, y teniendo en cuenta la dependencia, escribiremos $f(x)g(y)h(z) = fgh$.

De esto podemos darnos cuenta que la EDO para la función h es

$$\frac{d^2h}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}z^2h + k_3^2h = 0$$

Reconocemos a esta ecuación como la EDO de un oscilador armónico y sus soluciones, bien conocidas, están dados por:

$$\boxed{h(z) = A_{n_3}H_{n_3}(az)e^{a^2z^2/2}}$$

donde el parámetro a esta dado por

$$a^4 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

A partir de la energía para un oscilador armónico unidimensional (**1.54**), tenemos que:[12]

$$E_{n_3} = (n_3 + 1/2)$$

Por otro lado, de

$$k_3^2 = k^2 + \frac{1}{f}\frac{d^2f}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}qE'x + \frac{1}{g}\frac{d^2g}{dy^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}y^2$$

podemos obtener otra EDO para la función g, esto es:

$$\frac{1}{g}\frac{d^2g}{dy^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}y^2 = -k_2^2$$

donde

$$-k_2^2 = k_3^2 - k^2 - \frac{1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}qE'x$$

Otra manera de escribir la EDO para la función g es

$$\frac{d^2g}{dy^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}y^2g + k_2^2g = 0$$

ésta también corresponde a la EDO de un oscilador armónico y su solución está dado por

$$\boxed{g(y) = A_{n_2}H_{n_2}(ay)e^{a^2y^2/2}}$$

con

$$E_{n_2} = (n_2 + 1/2)$$

Finalmente, a partir de la relación

$$-k_2^2 = k_3^2 - k^2 - \frac{1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}qE'x$$

[12] Aquí, como sabemos, asumiremos $k_1^2 = 2mE_{n_1}/\hbar^2$, $k_2^2 = 2mE_{n_2}/\hbar^2$, $k_3^2 = 2mE_{n_3}/\hbar^2$

obtenemos la EDO para la función f, esto es:

$$\frac{1}{f}\frac{d^2f}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}qE'x = -k_1^2$$

donde

$$\begin{aligned} -k_1^2 &= k_3^2 + k_2^2 - k^2 \\ k^2 &= k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 \\ E &= E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} \end{aligned}$$

como era de esperar.
La EDO para la función f también puede escribirse como

$$\frac{d^2f}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 f + \frac{2m}{\hbar^2}qE'xf + k_1^2 f = 0$$

ésta EDO no se parece a las anteriores. Para solucionar esto, hacemos uso del parámetro "a" y el método de *completar cuadrados*, así que:

$$\begin{aligned} \frac{d^2f}{dx^2} - a^4x^2f + \frac{2a^4}{m\omega^2}qE'xf + k_1^2 f &= 0 \\ \frac{d^2f}{dx^2} - a^2(ax - \frac{aqE'}{m\omega^2})^2 f + \frac{a^4q^2E'^2}{m^2\omega^4}f + k_1^2 f &= 0 \end{aligned}$$

ésta EDO como tal, puede ser transformada a una ecuación matemática haciendo el siguiente cambio de variable

$$\xi = ax - \frac{aqE'}{m\omega^2} \Longrightarrow \frac{df}{dx} = \frac{df}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \frac{df}{d\xi}(a)$$

En esta nueva variable (teniendo en cuenta que "a" es constante) tenemos la siguiente ecuación diferencial para $f(\xi)$: [13]

$$a^2\frac{d^2f}{d\xi^2} - a^2\xi^2 f + \frac{a^4q^2E'^2}{m^2\omega^4}f + k_1^2 f = 0$$

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - \xi^2 f = -(\frac{a^2q^2E'^2}{m^2\omega^4} + \frac{k_1^2}{a^2})f$$

al comparar ésta ecuación con (**1.52**) obtenemos la siguiente igualdad

$$\frac{a^2q^2E'^2}{m^2\omega^4} + \frac{k_1^2}{a^2} = 2n_1 + 1$$

sustituyendo el valor de k_1 en la ecuación anterior

$$\frac{a^2q^2E'^2}{m^2\omega^4} + \frac{2mE_{n_1}}{a^2} = 2n_1 + 1$$

[13] Por simplicidad, teniendo en cuenta la dependencia de la la función en la nueva variable, vamos hacer uso de la forma simple $f = f(\xi)$

Despejando y reemplazando el valor de la constante "a" se obtiene el valor de E_{n_1}

$$\frac{2E_{n_1}}{\hbar\omega} + \frac{q^2E'^2}{2m\hbar\omega^3} = 2n_1 + 1$$

,

$$E_{n_1} = (n_1 + 1/2)\hbar\omega - \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}$$

Por lo tanto, la energía total de la partícula es

$$\begin{aligned} E_{n_1,n_2,n_3} &= E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} \\ &= \Big((n_1 + 1/2) + (n_2 + 1/2) + (n_3 + 1/2)\Big)\hbar\omega - \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

$$\boxed{E_{n_1,n_2,n_3} = (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2)\hbar\omega - \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}}$$

De acuerdo a **(1.62)** la función propia unidimensionales $f(x)$, con

$$\xi = ax - \frac{aqE'}{m\omega^2}$$

toma la forma

$$\boxed{f_{n_1}(x) = A_{n_1}H_{n_1}(ax)e^{-\frac{1}{2}(ax-\frac{aqE'}{m\omega^2})^2}}$$

1.5. Determine los niveles de energía de un sistema cuántico, que se encuentra en el potencial

$$V(x) = V_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$$

sugerencia: ejecute el cambio de variable de $y = e^{-\alpha z}$

Solución

Dado la forma del potencial, la ecuación de Schrödinger toma la forma siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})\psi(x) = E\psi(x)$$

al hacer el cambio de variable $y = e^{-\alpha x}$ tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= \frac{d\psi}{dy}\frac{dy}{dx} = \frac{d\psi}{dy}(-\alpha y) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dy}(-\alpha y\frac{d\psi}{dy})\frac{dy}{dx} = \alpha^2 y\frac{d\psi}{dy} + \alpha^2y^2\frac{d^2\psi}{dy^2} \end{aligned}$$

al sustituir, la ecuación de Schrödinger resulta

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha^2 y\frac{d\psi}{dy}+\alpha^2y^2\frac{d^2\psi}{dy^2}\right)+V_0(y^2-2y)\psi=E\psi \\
\alpha^2 y\frac{d\psi}{dy}+\alpha^2y^2\frac{d^2\psi}{dy^2}-\frac{2mV_0}{\hbar^2}y^2\psi+\frac{4mV_0}{\hbar^2}y\psi=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \\
y^2\frac{d^2\psi}{dy^2}+y\frac{d\psi}{dy}-\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2}y^2\psi+\frac{4mV_0}{\hbar^2\alpha^2}y\psi+\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}\psi=0 \\
\frac{d^2\psi}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d\psi}{dy}-\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2}\psi+\frac{4mV_0}{\hbar^2\alpha^2 y}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2y^2}\psi=0
\end{aligned}
$$

si definimos las contantes

$$
k^2=-\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} \qquad k'^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2}
$$

entonces la ecuación anterior toma la forma siguiente

$$
\frac{d^2\psi}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d\psi}{dy}+\left(\frac{2k'^2}{y}-k'^2-\frac{k^2}{y^2}\right)\psi=0
$$

La ecuación para $y\to\infty$ se convierte en

$$
\frac{d^2\psi_{as}}{dy^2}-k'^2\psi_{as}=0
$$

cuya solución viene a ser $\psi_{as}=e^{-k'y}$ y para $y\to 0$

$$
\frac{d^2\psi}{dy^2}-k'^2\psi=0
$$

su solución es $\psi_0=y^{+k}$
Por tanto, la solución general se puede escribir

$$
\psi=e^{-ky}y^kf(y)
$$

1.4.* Considere una partícula cargada en movimiento armónico simple, perturbado por un campo eléctrico constante E', es decir $\hat{H}'=-qE\hat{x}$. Calcule el corrimiento de la energía para wl n-ésimo nivel, en el primer y segundo orden de aproximación. *Utilizar* $\hat{a}$ *y* $\hat{a}^\dagger$.

Solución

El primer orden de aproximación a la energía esta dado por

$$
E_n^{(1)}=\left\langle n\left|\hat{H}'\right|n\right\rangle
$$

donde $\hat{H}'$ es el hamiltoniano de perturbación. Al sustituir éste en la ecuación anterior, tenemos

$$E_n^{(1)} = \langle n \left| -qE'\hat{x} \right| n \rangle$$

Por otro lado, al sustituir el operador de posición $\hat{x}$ en términos de los operadores de escalera, dado en (**1.4**), la energía en primera aproximación toma la forma siguiente

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \left\langle n \left| -qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right| n \right\rangle \\ &= -qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n \left| \hat{a} + \hat{a}^\dagger \right| n \rangle \end{aligned}$$

teniendo en cuenta (**1.19**) y (**1.24**)

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= -qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n \left| \sqrt{n} \right| n-1 \rangle + \left\langle n \left| \sqrt{n+1} \right| n+1 \right\rangle \right) \\ &= -qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n} \langle n|n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n|n+1 \rangle \right) \\ &= -qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n,n+1} \right) \end{aligned}$$

claramente, de esto se deriva que la energía en primer orden de aproximación es cero, esto es

$$\boxed{E_n^{(1)} = 0}$$

La energía en segunda aproximación en dada por

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{\left| \left\langle n \left| \hat{H}' \right| k \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

donde:

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2), \qquad E_k^{(0)} = \hbar\omega(k + 1/2)$$

son las energías en aproximación cero.
Al reemplazar el hamiltoniano de perturbación $\hat{H}'$ y el operador de posición $\hat{x}$,

entonces la energía $E_n^{(2)}$ viene a ser

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{k\neq n} \frac{\left|\langle n\left|-qE'\hat{x}\right|k\rangle\right|^2}{\Big(\hbar\omega(n+1/2)-\hbar\omega(k+1/2)\Big)} \\
&= \sum_{k\neq n} \frac{\left(-qE'\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^2 \left|\langle n\left|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\right|k\rangle\right|^2}{\hbar\omega(n-k)} \\
&= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\sum_{k\neq n}\frac{\left|\left\langle n\left|\sqrt{k}\right|k-1\right\rangle + \langle n\left|\sqrt{k+1}\right|k+1\rangle\right|^2}{n-k} \\
&= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\sum_{k\neq n}\frac{\left|\sqrt{k}\,\langle n|k-1\rangle + \sqrt{k+1}\,\langle n|k+1\rangle\right|^2}{n-k} \\
&= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\sum_{k\neq n}\frac{\left|\sqrt{k}\delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{n,k+1}\right|^2}{n-k}
\end{aligned}$$

Ahora, al analizar el numerador vemos que de todos los términos sumandos solo dos sobreviven, esto es:

Si $n=(k-1)$

$$\begin{aligned}
E_{(k-1)}^{(2)} &= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\sum_{k\neq n}\frac{\left|\sqrt{k}\delta_{k-1,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{k-1,k+1}\right|^2}{(k-1)-k} \\
&= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\frac{\left|\sqrt{k}\right|^2}{-1} \\
&= -\frac{q^2E'^2k}{2m\omega^2} \\
&= -\frac{q^2E'^2(n+1)}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Si $n=(k+1)$

$$\begin{aligned}
E_{(k+1)}^{(2)} &= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\sum_{k\neq n}\frac{\left|\sqrt{k}\delta_{k+1,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{k+1,k+1}\right|^2}{(k+1)-k} \\
&= \frac{q^2E'^2}{2m\omega^2}\frac{\left|\sqrt{k+1}\right|^2}{1} \\
&= \frac{q^2E'^2(k+1)}{2m\omega^2} \\
&= \frac{q^2E'^2n}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la energía en segunda aproximación (que resulta de sumar los dos términos sobrevivientes) está dado por

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= E_{(k-1)}^{(2)} + E_{(k+1)}^{(2)} \\ &= -\frac{q^2 E'^2 (n+1)}{2m\omega^2} + \frac{q^2 E'^2 n}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

$$\boxed{E_n^{(2)} = -\frac{q^2 E'^2}{2m\omega^2}}$$

y la energía del sistema E_n viene a ser

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - \frac{q^2 E'^2}{2m\omega^2}}$$

tal y como se obtuvo al resolver mediante la teoría del oscilador armónico.

2

Momento angular

2.1. Un breve tratamiento teórico

Se define el momento angular $\boldsymbol{L}$ de una partícula de masa m con momento lineal $\boldsymbol{p}$ situada en una posición $\boldsymbol{x}$, con respecto a un sistema de coordenadas de origen fijo, como

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p} \tag{2.1}$$

2.1.1. Momento angular orbital

En la mecánica cuántica, donde $\boldsymbol{x}$ y $\boldsymbol{p}$ son operadores, la ecuación (2.1) viene a ser

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\nabla} \tag{2.2}$$

aquí el operador $\hat{\boldsymbol{L}}$ es conocido como *operador de momento angular orbital*. En la representación de las coordenadas, las componentes de tal operador son dadas por

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \tag{2.3}$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \tag{2.4}$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \tag{2.5}$$

Es usual combinar estás tres componentes y escribir de manera compacta, usando la notación de Einstein, mediante

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k = -i\hbar\epsilon_{ijk}x_j\partial_k \tag{2.6}$$

donde se define $\partial_k = \frac{\partial}{\partial x^k}$ y ϵ_{ijk} es el tensor anti-simétrico Levi-Civita, con $\epsilon_{123} = 1$.

El álgebra que satisface las componentes del momento angular es dado por

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{2.7}$$

A partir de (2.6) se define el cuadrado del operador momento angular como

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_i \hat{L}_i \tag{2.8}$$

y satisface

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_i] = 0 \tag{2.9}$$

La relación (2.9) implica que si el estado $|\alpha_l, m\rangle$ es un eigenestado de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$, éste también es un eigenestado de las componentes $\hat{L}_i$.[1] Por consiguiente, podemos establecer

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}}^2 |\alpha_l, m\rangle &= \hbar^2 \alpha_l |\alpha_l, m\rangle && (2.10) \\ \hat{L}_z |\alpha_l, m\rangle &= \hbar m |\alpha_l, m\rangle && (2.11) \end{aligned}$$

2.1.2. Operadores de escalera

Con las componentes del momento angular es posible definir operadores escalera, no hermitianos $\hat{L}_+ = (\hat{L}_-)^\dagger$, denotados por $\hat{L}_\pm$ de tal manera que

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \tag{2.12}$$

de donde

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_x + \hat{L}_-) \qquad \hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \tag{2.13}$$

Al efectuar el producto $\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm$ se genera la siguiente identidad

$$\begin{aligned} \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm &= (\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) \\ &= \hat{L}_x\hat{L}_x \pm i\hat{L}_x\hat{L}_y \mp i\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y \\ &= (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) \pm i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \\ &= \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z && (2.14) \end{aligned}$$

Considerando el conmutador (2.7) se puede obtener

$$\begin{aligned} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] &= [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y] \\ &= [\hat{L}_x, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_y] \\ &= -i(i\hbar\hat{L}_z) + i(-i\hbar\hat{L}_z) \\ &= 2\hbar\hat{L}_z && (2.15) \end{aligned}$$

De (2.7) y de la definición (2.12) se deriva

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y] \\ &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] \\ &= i\hbar\hat{L}_y \pm \hbar\hat{L}_x \\ &= \pm\hbar\hat{L}_\pm && (2.16) \end{aligned}$$

[1] Es común trabajar con la tercera componente o la componente z del momento angular $\hat{L}_z$.

esto implica que los operadores $\hat{L}_z$ y $\hat{L}_\pm$ no poseen eigenestados en común. Considerando (**2.16**) y (**2.11**) veamos la acción del operador $\hat{L}_\pm$ sobre un eigenestado $|\alpha_l, m\rangle$ de $\hat{L}_z$

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_z\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle &= \left([\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] + \hat{L}_\pm\hat{L}_z\right)|\alpha_l, m\rangle \\
&= \pm\hbar\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle + \hat{L}_\pm\hat{L}_z |\alpha_l, m\rangle \\
&= \pm\hbar\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle + \hbar m\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle \\
&= \hbar(m \pm 1)\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle \qquad (2.17)
\end{aligned}
$$

el resultado (**2.17**) nos conduce a establecer que los operadores $\hat{L}_\pm$ alteran el número cuántico m. El operador $\hat{L}_+$ aumenta el eigenvalor de $\hat{L}_z$ en una unidad de $\hbar$, razón por la cual $\hat{L}_+$ es llamado *operador de subida*; por otro lado, el operador $\hat{L}_-$ disminuye el eigenvalor de $\hat{L}_z$ en una unidad de $\hbar$ y por ende $\hat{L}_+$ es llamado *operador de bajada*.
De manera similar, de (**2.9**) y (**2.12**) se tiene

$$
\begin{aligned}
[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_\pm] &= [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y] \\
&= [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] \pm i[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_y] \\
&= 0 \qquad (2.18)
\end{aligned}
$$

de donde se deduce que $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ y $\hat{L}_\pm$ tienen eigenestados en común. Tal resultado se puede usar para ver la acción del operador $\hat{L}_\pm$ sobre el eigenestado $|\alpha_l, m\rangle$ de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{L}_\pm |\alpha, m\rangle &= \left([\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_\pm] + \hat{L}_\pm\hat{\boldsymbol{L}}^2\right)|\alpha_l, m\rangle \\
&= \hbar^2\alpha_l\hat{L}_\pm |\alpha_l, m\rangle \qquad (2.19)
\end{aligned}
$$

el resultado (**2.19**) implica que los operadores $\hat{L}_\pm$ dejan inalterado el número cuántico α_l del eigenestado de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$.
Como el operador $\hat{L}_+$ aumenta el número m en una unidad de $\hbar$, entonces podemos establecer una proporción entre el estado $\hat{L}_+ |\alpha_l, m\rangle$ y el estado $|\alpha_l, m+1\rangle$, esto es

$$
\hat{L}_+ |\alpha_l, m\rangle = A_+(\alpha_l, m)\,|\alpha_l, m+1\rangle \qquad (2.20)
$$

De manera similar, como el operador $\hat{L}_-$ disminuye el número m en una unidad de $\hbar$, entonces podemos establecer una proporción entre el estado $\hat{L}_- |\alpha_l, m\rangle$ y el estado $|\alpha_l, m-1\rangle$, esto es

$$
\hat{L}_- |\alpha_l, m\rangle = A_-(\alpha_l, m)\,|\alpha_l, m-1\rangle \qquad (2.21)
$$

Al analizar la diferencia de los operadores $\hat{\boldsymbol{L}}^2$, $\hat{L}_z^2$ y tomar su amplitud se obtiene

$$
\begin{aligned}
\left\langle \alpha_l, m \left| \hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{L}_z^2 \right| \alpha_l, m \right\rangle &= \left\langle \alpha_l, m \left| \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \right| \alpha_l, m \right\rangle \\
&= \left\langle \alpha_l, m \left| \hbar^2(\alpha_l + m^2) \right| \alpha_l, m \right\rangle \\
&= \alpha_l + m^2 \geq 0 \qquad (2.22)
\end{aligned}
$$

y de (**2.22**) se sigue que

$$\alpha_l \geq m^2 \tag{2.23}$$

El resultado (**2.23**) implica que existe un estado con numero máximo (mínimo) m que lo denotaremos por m_{max} (m_{min}), tal que a partir de éste no es posible obtener otro estado por intermedio del operador de subida (bajada) con un numero cuántico m mayor (menor). Para el primer caso, podemos escribir este resultado como:

$$\hat{L}_+ \left|\alpha_l, m_{max}\right\rangle = 0 \tag{2.24}$$

por otro lado, de (**2.10**), (**2.11**) y de la relación (**2.14**) se deriva

$$\begin{aligned} \hat{L}_-\hat{L}_+ \left|\alpha_l, m_{max}\right\rangle &= (\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z) \left|\alpha_l, m_{max}\right\rangle \\ &= \hbar^2(\alpha_l - m_{max}^2 - m_{max}) \\ &= \hbar^2(\alpha_l - m_{max}(m_{max}+1)) \end{aligned} \tag{2.25}$$

y para que en (**2.25**) se satisfaga (**2.24**) se tiene que

$$\alpha_l = m_{max}(m_{max}+1) \tag{2.26}$$

De manera similar, para el segundo caso se puede escribir

$$\hat{L}_- \left|\alpha_l, m_{min}\right\rangle = 0 \tag{2.27}$$

También, al considerar (**2.10**), (**2.11**) y la relación (**2.14**) se puede obtener

$$\begin{aligned} \hat{L}_+\hat{L}_- \left|\alpha_l, m_{min}\right\rangle &= (\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z) \left|\alpha_l, m_{min}\right\rangle \\ &= \hbar^2(\alpha_l - m_{min}^2 + m_{min}) \\ &= \hbar^2(\alpha_l - m_{min}(m_{min}-1)) \end{aligned} \tag{2.28}$$

y para que en (**2.25**) se satisfaga (**2.24**) se tiene que

$$\alpha_l = m_{min}(m_{min}-1) \tag{2.29}$$

Finalmente, al comparar (**2.26**) y (**2.29**) se obtiene la solución aceptable

$$m_{max} = -m_{min} \tag{2.30}$$

Si el estado $\left|\alpha_l, m_{min}\right\rangle$ se obtiene al aplicar k veces (con k entero) el operador de bajada $\hat{L}_-$ al estado $\left|\alpha_l, m_{max}\right\rangle$, entonces

$$m_{max} - k = m_{min}$$

y ya que $m_{max} = -m_{min}$, el resultado anterior equivale a escribir

$$m_{max} = -m_{min} = \frac{k}{2} \tag{2.31}$$

Al reemplazar (**2.31**) en (**2.26**) y considerar $l = k/2$ (con l múltiplo semi-entero) se tiene

$$\alpha_l = l(l+1), \qquad -l \leq m \leq l \tag{2.32}$$

otra manera de escribir (**2.32**) es

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, ... \qquad m = -l, -l+1, l+2, .., l-2, l-1, l$$

Debido a que $\alpha_l = l(l+1)$, es usual expresar los resultados (**2.10**) y (**2.11**) mediante

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 \left|l, m\right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left|l, m\right\rangle \tag{2.33}$$
$$\hat{L}_z \left|l, m\right\rangle = \hbar m \left|l, m\right\rangle \tag{2.34}$$

Finalmente, la ecuación de eigenvalores de los operadores de escalera toman la forma siguiente [2]

$$\hat{L}_\pm \left|l, m\right\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \left|l, m \pm 1\right\rangle \tag{2.35}$$

2.1.3. Eigenfunciones del momento angular

Los armónicos esféricos

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}(-1)^m P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi} \tag{2.36}$$

Tabla 2.1: Primeros armónicos esféricos, $Y_l^m(\theta, \varphi)$

Y_0^0	$=$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$Y_1^{\pm 1}$	$=$	$\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sen\theta e^{\pm i\varphi},$
Y_1^0	$=$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta$
$Y_2^{\pm 1}$	$=$	$\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}sen\theta cos\theta e^{\pm i\varphi}$
$Y_2^{\pm 2}$	$=$	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sen^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$
Y_2^0	$=$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3cos^2\theta - 1)$
$Y_3^{\pm 1}$	$=$	$\mp\sqrt{\frac{21}{64\pi}}sen\theta(5cos^2\theta - 1)e^{\pm i\varphi}$
$Y_3^{\pm 2}$	$=$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}}sen^2\theta cos\theta e^{\pm 2i\varphi}$
$Y_3^{\pm 3}$	$=$	$\mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}sen^3\theta e^{\pm 3i\varphi}$
Y_3^0	$=$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}}cos\theta(5cos^2\theta - 3)$

[2] Véase en la parte de Problemas resueltos el ejercicio **2.1.** para la demostración.

2.1.4. Spin

2.1.5. Adición de momento angular

2.2. Problemas Resueltos

2.1. Demostrar que:

$$\hat{L}_\pm |l,m\rangle = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,|l,m\pm 1\rangle \tag{2.37}$$

Solución

Sea

$$\hat{L}_\pm |l,m\rangle = A_\pm(l,m)\,|l,m\pm 1\rangle$$

siendo $A_\pm(l,m)$ el coeficiente a determinar.
Al normalizar el estado $\hat{L}_\pm |l,m\rangle$ se tiene

$$\langle l,m|\,\hat{L}_\pm^\dagger \hat{L}_\pm\,|l,m\rangle = A_\pm^*(l,m)A_\pm(l,m)\,\langle l,m\pm 1|l,m\pm 1\rangle$$

teniendo en cuenta que $\hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp$ y denotando $|A_\pm|^2 = A_\pm^*(l,m)A_\pm(l,m)$ y además considerando que los estados $\langle l,m\pm 1|l,m\pm 1\rangle$ están normalizados, entonces la ecuación anterior toma la forma

$$\langle l,m|\,\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm\,|l,m\rangle = |A_\pm|^2$$

Ahora bien, al usar la relación (**2.14**) y considerar (**2.33**) y (**2.34**), ésta ultima ecuación viene a ser

$$\begin{aligned}
|A_\pm|^2 &= \langle l,m|\,\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm\,|l,m\rangle \\
&= \langle l,m|\,\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z\,|l,m\rangle \\
&= \langle l,m|\,\hbar^2(l(l+1) - m^2 \mp m)\,|l,m\rangle \\
&= \hbar^2(l(l+1) - m^2 \mp m)\,\langle l,m|\,|l,m\rangle \\
&= \hbar^2(l^2 + l - m^2 \mp m) \\
&= \hbar^2\Big((l-m)(l+m) + (l\mp m)\Big) \\
&= \hbar^2(l\mp m)(l\pm m+1)
\end{aligned}$$

de donde

$$\boxed{A_\pm(l,m) = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}}$$

y por lo tanto

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

2.2. Partiendo de la relación

$$\hat{L}_{\pm}\hat{L}_{\mp} = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z$$

demostrar que

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2 (\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2})$$

Solución

De la definición

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \qquad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

Como en coordenadas esféricas los operadores $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ tienen la forma

$$\hat{L}_+ = i\hbar(sen\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{cos\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \qquad \hat{L}_- = i\hbar(-cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{sen\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \qquad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Entonces, el operador $\hat{L}_+$ en tales coordenadas es

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &= i\hbar\left(sen\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{cos\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - icos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{sen\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= i\hbar\left((sen\varphi - icos\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{tan\theta}(cos\varphi + isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= \hbar\left((cos\varphi + isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{tan\theta}(cos\varphi + isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= \hbar e^{i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \end{aligned}$$

Aquí, en la parte final, se hizo uso de la identidad de Euler

$$e^{i\varphi} = cos\varphi + isen\varphi$$

De manera similar, ahora el operador $\hat{L}_-$, tendrá la forma

$$\begin{aligned} \hat{L}_- &= i\hbar\left(sen\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{cos\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + icos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - i\frac{sen\varphi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= i\hbar\left((sen\varphi + icos\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{tan\theta}(cos\varphi - isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= \hbar\left((-cos\varphi + isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{tan\theta}(cos\varphi - isen\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= -\hbar e^{-i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \end{aligned}$$

La expresión obtenida para $\hat{L}_+$ junto con la expresión de $\hat{L}_+$, se pueden escribir en forma compacta como:

$$\hat{L}_{\pm} = \pm\hbar e^{\pm i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

Ahora bien, para obtener una expresión de la forma del producto de operadores $\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp$ haremos uso de una función arbitraria con dependencia en las variables angulares θ y φ, ésto es $\psi = \psi(\theta, \varphi)$[3]. Por lo tanto, la acción de este producto sobre ψ será

$$\begin{aligned}
(\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp)\psi &= \left(\pm\hbar e^{\pm i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \mp \hbar e^{\mp i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} \mp \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})\right)\psi \\
&= -\hbar^2 e^{\pm i\varphi}\left((\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})(e^{\mp i\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} \mp e^{\mp i\varphi}\frac{i}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi})\right) \\
&= -\hbar^2 e^{\pm i\varphi}\left(e^{\mp i\varphi}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \mp ie^{\mp i\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}(-csc^2\theta) \mp \frac{ie^{\mp i\varphi}}{tan\theta}(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta\partial\varphi} - \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi\partial\theta})\right. \\
&\quad \left.\pm\frac{i}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}(\mp i)e^{\mp i\varphi} - \frac{(i)^2}{tan^2\theta}(\mp i)e^{\mp i\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - \frac{(i)^2}{tan^2\theta}e^{\mp i\varphi}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \pm icsc^2\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} \mp \frac{i}{tan^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \pm i(csc^2\theta - \frac{1}{tan^2\theta})\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \pm i\frac{(1 - cos^2\theta)}{sen^2\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \pm i\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)
\end{aligned}$$

De esto tenemos la expresión para el producto

$$\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp = -\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \pm i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$$

Por otro lado, a partir de la relación

$$\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar\hat{L}_z$$

El cuadrado del operador momento angular es

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_\pm\hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z$$

Remplazando la expresión encontrada para el producto de los operadores $\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp$ y la expresión para el operador $\hat{L}_z$ en el lado derecho de esta ultima ecuación, tenemos lo siguiente

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= -\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \pm i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \pm i\hbar^2\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= -\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \pm i\frac{\partial}{\partial\varphi} \mp i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) \\
&= -\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{tan^2\theta + 1}{tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})
\end{aligned}$$

[3]En general, para obtener la expresión de cualquier operador se hace uso de una función arbitraria

Por lo tanto, la expresión para el cuadrado del operador momento angular en coordenadas esféricas es:

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}$$

2.3. Verifique que

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}$$

Donde

$$\hat{p}_r^2 = \frac{-\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

Solución

El operador momento en el espacio de las coordenadas esta dado por

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$$

Si elevamos al cuadrado, obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2 = -\hbar^2\Delta$$

Teniendo en cuenta que el *operador laplaciano* en coordenadas esféricas tiene la forma

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Entonces, el cuadrado del operador momento en coordenadas esféricas toma la forma

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{p}}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\\
&= -\hbar^2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sen\theta}\left(cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + sen\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) + \frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\\
&= -\hbar^2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right)
\end{aligned}$$

Por otra lado, ya hemos visto que el operador momento angular en coordenadas esféricas tiene la forma

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

Ahora bien, si comparamos esto con la ultima expresión obtenida para $\hat{\boldsymbol{p}}^2$ tenemos

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \frac{-\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}$$

De donde inmediatamente deducimos que:

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}}$$

2.4. Considere la función de onda

$$\psi(r,\theta,\varphi) = Nsen^2\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}$$

verifique que:

(a) $\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi = 6\hbar^2\psi$

(b) $\hat{L}_z\psi = 2\hbar^2\psi$

Solución

Para demostrar la parte (a) partimos de lo que ya hemos visto, que la acción del operador de momento angular, en coordenadas esféricas, sobre una función $\psi = \psi(r,\theta,\varphi)$ es

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi$$

Como la forma de la función ψ ya es dada, para determinar el resultado final del operador vamos a calcular el resultado de cada sumando del operador sobre la función ψ

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\theta}\psi &= \frac{\partial}{\partial\theta}(Nsen^2\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}) \\
&= 2Nsen\theta cos\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi &= \frac{\partial}{\partial\theta}(2Nsen\theta cos\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}) \\
&= 2N\left((cos^2\theta - sen^2\theta)e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}\right) \\
&= 2N\left((1 - 2sen^2\theta)e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi &= \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}(Nsen^2\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2})\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(Nsen^2\theta(2i)e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}\right) \\
&= Nsen^2\theta(2i)(2i)e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2} \\
&= -4Nsen^2\theta e^{2i\varphi} r e^{\frac{1}{2}\alpha r^2}
\end{aligned}$$

Sustituyendo estas expresiones en $\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi$ se obtiene

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tan\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) \\
&= -2N\hbar^2\left((1-2sen^2\theta) + \frac{1}{tan\theta}(sen\theta cos\theta) - 2\frac{1}{sen^2\theta}(sen^2\theta)\right)e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2} \\
&= -2N\hbar^2\left(1-2sen^2\theta + cos^2\theta - 2\right)e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2} \\
&= -2N\hbar^2\left(-1-2sen^2\theta + cos^2\theta\right)e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2}
\end{aligned}$$

y usando la identidad

$$cos^2\theta - 1 = -sen^2\theta$$

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2\psi &= -2N\hbar^2\left(-sen^2\theta - 2sen^2\theta\right)e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2} \qquad (2.38) \\
&= 6N\hbar^2 sen^2\theta e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2}
\end{aligned}$$

Se encuentra que la acción de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ sobre ψ está dado por

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi = 6\hbar^2\psi}$$

Para la parte (b), simplemente debemos recordar como es la representación de la componente z del operador momento angular, y al actuar sobre la función ψ se obtendrá el siguiente resultado

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}(Nsen^2\theta e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2}) \\
&= -i\hbar Nsen^2\theta(2i)e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2} \\
&= 2\hbar Nsen^2\theta e^{2i\varphi}re^{\frac{1}{2}\alpha r^2}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{L}_z\psi = 2\hbar\psi}$$

2.5. Una partícula tiene la siguiente función de onda $\psi(x,y,z) = N(x+y+2z)e^{-\alpha r}$, donde $\alpha > 0$ es real. Demostrar que ψ se puede escribir como la siguiente expansión de funciones

$$\psi(r,\theta,\phi) = N\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left[\frac{i-1}{2}Y_{11} + \frac{i+1}{2}Y_{1,-1} + \sqrt{2}Y_{10}\right]$$

¿Cuál es la probabilidad de que una medición de la proyección del momento angular de los valores $\pm h, 0$?

Solución

Kelvin J.

La función de onda de la partícula ψ escrita en coordenadas esféricas

$$x = rsen\theta cos\varphi \quad y = rsen\theta sen\varphi \quad z = rcos\theta$$

toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\varphi) &= N(rsen\theta cos\varphi + rsen\theta sen\varphi + 2rcos\theta)e^{-\alpha r}\\ &= N(sen\theta cos\varphi + sen\theta sen\varphi + 2cos\theta)re^{-\alpha r}\end{aligned}$$

Por otro lado, teniendo en cuenta la Tabla 2.1 y haciendo uso de la identidad de Euler, es posible escribir los primeros armónicos esféricos de la siguiente manera

$$\begin{aligned}Y_1^{-1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sen\theta(cos\varphi - isen\varphi)\\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta\\ Y_1^1 &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sen\theta(cos\varphi + isen\varphi)\end{aligned}$$

de donde al sumar y restar Y_1^{-1} y Y_1^1 se obtiene

$$\begin{aligned}Y_1^{-1} + Y_1^1 &= -2i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sen\theta sen\varphi\\ Y_1^{-1} - Y_1^1 &= 2\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sen\theta cos\varphi\end{aligned}$$

respectivamente.
Por tanto, la función de onda $\psi(r,\theta,\varphi)$, en términos de los armónicos esféricos, adopta la forma siguiente

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\varphi) &= N\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_1^{-1} - Y_1^1) - \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_1^{-1} + Y_1^1) + 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0\right)re^{-\alpha r}\\ &= N\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(\frac{1}{2}(Y_1^{-1} - Y_1^1) - \frac{1}{2i}(Y_1^{-1} + Y_1^1) + \frac{2}{\sqrt{2}}Y_1^0\right)re^{-\alpha r}\\ &= N\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(\frac{1}{2}(-1 - \frac{1}{i})Y_1^1 + \frac{1}{2}(1 - \frac{1}{i})Y_1^{-1} + \frac{2}{\sqrt{2}}Y_1^0\right)re^{-\alpha r}\end{aligned}$$

$$\boxed{\psi(r,\theta,\varphi) = N\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(\frac{i-1}{2}Y_1^1 + \frac{i+1}{2}Y_1^{-1} + \sqrt{2}Y_1^0\right)re^{-\alpha r}}$$

2.5. En un tiempo dado, la funcion de onda angular de un sistema cuántico se encuentra en:

$$\psi(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}sen\theta sen\varphi$$

¿Qué posibles calores de $\hat{L}_z$ se obtienen en una medición y con que probabilidad? Calcule $\left\langle \hat{L}_x \right\rangle$ y $\left\langle \hat{\boldsymbol{L}}^2 \right\rangle$, para este estado particular.

Solución

A partir del resultado encontrado en el problema anterior

$$Y_1^1 + Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} sen\theta sen\varphi$$

se puede derivar

$$sen\theta sen\varphi = -\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_1^1 + Y_1^{-1})$$

en consecuencia, la función de onda $\psi(\theta,\varphi)$ toma la forma siguiente

$$\begin{aligned}\psi(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} sen\theta sen\varphi \\ &= -\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_1^1 + Y_1^{-1})\end{aligned}$$

$$\boxed{\psi(\theta,\varphi) = i\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_1^1 + Y_1^{-1})}$$

Claramente podemos darnos cuenta que la función de onda posee momento angular definido ($l = 1$), sin embargo su proyección $m = -1, +1$ no esta definida.
Por tanto, como los coeficiente para $m = -1$ y $m = +1$ son iguales, podemos concluir que: Hay una probabilidad de 50 % de encontrar a la función de onda (con $l = 1$) con eigenvalores de $\hat{L}_z$ de $m = -1$ o $m = +1$.
Ahora veamos la manera de obtener el valor esperado $\left\langle \hat{L}_x \right\rangle$. Debido a que no hemos encontrado una manera directa de como la componente $\hat{L}_x$ actúa sobre algún estado $|l, m\rangle$, entonces haremos uso de los operadores escalera dado en (**2.13**) para obtener tal propósito. Ésto es

2.5. Determinar los coeficientes de Clebsch-Gordon en el caso del acoplamiento de los espines de dos partículas ambas con $s = 1/2$.

2.6. Calcular los coeficientes de Clebsh-Gordan para el acoplamiento $l = 2$ y $s = 3/2$, de los siguientes estados acoplados:

Bibliografía

[1] R.W Robinett, *Quantum Mechanics* (2nd edition), Oxford University Press, New York, 2006.

[2] S.Gasiorowics, *Quantum Physics* (3rd edition), Jhon Wiley, USA, 2003.

[3] D.J.Griffiths, *Introduction to quantum mechanics* (2nd edition), Addison-Wesley 2005.

[4] N. Zettili *Quantum Mechanics* (2nd edition), Jhon Wiley, USA, 2009.

[5] A. Das *Lectures on Quantum Mechanics* (2nd edition), World Scientific , USA, 2012.

[6] W. Nolting *Theorical Physics 6- Quantum Mechanics* (2nd edition), Springer, Switzerland , 2017.

[7] R.Shankar *Principles of Quantum Mechanics* (2nd edition), Springer, USA , 2008.

[8] Rivasplata. A *Mecánica Cuántica: Apuntes Introductorios* Universidad Nacional de Trujillo-2008.

[9] S.Hassani *Mathematical Methods for Students of Physics and Related Fields* (2nd edition), Springer, USA , 2009.