Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

MECÁNICA CUÁNTICA (2431)
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mecanicacuantica.html

Tarea 8
Métodos Matemáticos para la Mecánica Cuántica
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mc_t8.pdf

1°) **Resumen de algunos resultados relacionados con el operador momentum angular orbital**
Como se comentó en clase, a partir de las componentes del momentum angular clásico,

$$L_x = yp_z - zp_y\,, \quad L_y = zp_x - xp_z\,, \quad L_z = xp_y - yp_x, \tag{1.1}$$

y luego de usar las asociaciones

$$x_k \to \hat{X}_k\,, \quad p_k \to \hat{P}_k \quad (k = 1, 2, 3), \tag{1.2}$$

donde $[\hat{X}_k, \hat{P}_l] = \mathrm{i}\hbar\,\delta_{kl}$, y $[\hat{X}_k, \hat{X}_l] = [\hat{P}_k, \hat{P}_l] = \hat{0}$, se pueden obtener las componentes del operador momentum angular,

$$\hat{L}_x = \hat{L}_x^\dagger = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y\,, \quad \hat{L}_y = \hat{L}_y^\dagger = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z\,, \quad \hat{L}_z = \hat{L}_z^\dagger = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x. \tag{1.3}$$

En la representación de las coordenadas, las componentes del momentum angular $\hat{\mathcal{L}}_x$, $\hat{\mathcal{L}}_y$, $\hat{\mathcal{L}}_z$, donde $\langle\, x \mid \hat{L}_x \mid \psi\,\rangle \equiv \hat{\mathcal{L}}_x \langle\, x \mid \psi\,\rangle$, etc., vienen dadas por

$$\hat{\mathcal{L}}_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{\mathcal{L}}_y = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad \hat{\mathcal{L}}_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{1.4}$$

Ya que los operadores de momentum angular actúan solo sobre las variables angulares, es muy conveniente trabajar en coordenadas esféricas ($r \geq 0$, $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi)$). (a) Demuestre los siguientes resultados:

$$\hat{\mathcal{L}}_x = \mathrm{i}\hbar\left[\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \tag{1.5}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_y = \mathrm{i}\hbar\left[-\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \tag{1.6}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}, \tag{1.7}$$

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 \equiv \hat{\mathcal{L}}_x^2 + \hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right], \tag{1.8}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\,\cdot\,) + \frac{1}{2\mathrm{m}\,r^2}\,\hat{\boldsymbol{L}}^2 + V(\mathbf{r}), \tag{1.9}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_{\pm} = \hat{\mathcal{L}}_x \pm \mathrm{i}\hat{\mathcal{L}}_y = \hbar \exp(\pm \mathrm{i}\phi) \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathrm{i} \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right]. \tag{1.10}$$

(b) Escriba las dos ecuaciones diferenciales parciales correspondientes a los siguientes dos problemas de autovalores:

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 \psi(r,\theta,\phi) \equiv l(l+1)\hbar^2 \psi(r,\theta,\phi)\,, \quad \hat{\mathcal{L}}_z \psi(r,\theta,\phi) = m\hbar\psi(r,\theta,\phi), \tag{1.11}$$

donde, para un l fijo, m solo puede tomar los valores $-l$, $-l+1$, ..., $l-1$, $+l$. Observe que las autofunciones de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ y $\hat{\mathcal{L}}_z$ no dependen de r, solo de θ y ϕ. Estas autofunciones usualmente se denotan como $Y_l^m(\theta,\phi)$. Sin embargo, podemos escribirlas como $\psi(r,\theta,\phi) = \psi_{l,m}(r,\theta,\phi) = f(r) Y_l^m(\theta,\phi)$, donde $f(r)$ es una constante de integración (pero que permite que $\psi_{l,m}$ sea de cuadrado integrable). (c) Demuestre que la normalización de $\psi_{l,m}(r,\theta,\phi)$ conduce a las relaciones

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \sin(\theta)\, |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = 1\,, \quad \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\, r^2\, |f(r)|^2 = 1. \tag{1.12}$$

(d) Resuelva el problema de autovalores para $\hat{\mathcal{L}}_z$. Demuestre que las autofunciones de $\hat{\mathcal{L}}_z$ tienen la forma

$$Y_l^m(\theta,\phi) = F_l^m(\theta) \exp(\mathrm{i}m\phi), \tag{1.13}$$

donde $m = \text{entero}$ (Note que $Y_l^m(\theta,\phi=0) = Y_l^m(\theta,\phi=2\pi)$). Si m es entero entonces l no puede ser semi-entero, es decir, l debe ser entero. (e) Considere un valor entero de l (positivo o cero). Se sabe de la teoría general del momentum angular que $\hat{J}_+ |j, m=+j\rangle = 0$ (vea la fórmula (2.6) en el 2° problema), de manera que podemos escribir la siguiente fórmula:

$$\hat{\mathcal{L}}_+ Y_l^{m=l}(\theta,\phi) = 0. \tag{1.14}$$

Encuentre la solución de (1.14). Aquí tiene la respuesta:

$$Y_l^l(\theta,\phi) = F_l^l(\theta) \exp(\mathrm{i}l\phi) = C_l \sin^l(\theta) \exp(\mathrm{i}l\phi), \tag{1.15}$$

donde C_l es una constante de normalización. (f) Se sabe de la teoría general del momentum angular que $\hat{J}_- |j, m=+j\rangle = \hbar\sqrt{2j}\, |j, j-1\rangle$ (vea la fórmula (2.6) en el 2° problema), de manera que podemos escribir la siguiente fórmula:

$$\hat{\mathcal{L}}_- Y_l^{m=l}(\theta,\phi) = \hbar\sqrt{2l}\, Y_l^{l-1}(\theta,\phi). \tag{1.16}$$

Es claro que el lado izquierdo de esta relación se puede conocer (luego de calcular la acción de $\hat{\mathcal{L}}_-$ sobre $Y_l^l(\theta,\phi)$), de esta forma se obtiene a $Y_l^{l-1}(\theta,\phi)$. Aplicando repetidamente al operador $\hat{\mathcal{L}}_-$ (sobre $Y_l^{l-1}(\theta,\phi)$, $Y_l^{l-2}(\theta,\phi)$, ..., $Y_l^{-l+1}(\theta,\phi)$) se pueden obtener las funciones $Y_l^{l-2}(\theta,\phi)$, $Y_l^{l-3}(\theta,\phi)$, ..., $Y_l^{-l}(\theta,\phi)$. Recapitulando, al par de autovalores $l(l+1)\hbar^2$ y $m\hbar$, donde l es un entero positivo arbitrario o cero, y m es otro entero tal que $-l \leq m \leq +l$), le corresponde una y solo una autofunción $Y_l^m(\theta,\phi)$ (que puede ser obtenida a partir de $Y_l^l(\theta,\phi)$ en (1.15)). Las autofunciones $Y_l^m(\theta,\phi)$ son los llamados armónicos esféricos.

2°) **Resumen de algunos resultados relacionados con el operador momentum angular** Sea $\hat{\mathbf{J}}$ un momentum angular arbitrario y cuyas componentes, por lo tanto, obedecen las relaciones de conmutación

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = \mathrm{i}\hbar\, \epsilon_{klm}\, \hat{J}_m. \tag{2.1}$$

Siendo $j(j+1)\hbar^2$ y $m\hbar$ los autovalores de $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ y $\hat{J}_z$, entonces se tiene que:

(i) Los únicos valores posibles para j son los enteros o los semi-enteros positivos o el cero, es decir,

0, 1/2, 1, 3/2, 2, ... (estos son los únicos posibles, aunque no todos ellos se presentan para todos los momenta angular).

(ii) Para un valor fijo de j, los únicos valores posibles para m son los $(2j+1)$ números: $-j$, $-j+1$, ..., , $j-1$, j; por lo tanto, m es entero si j es entero, y semi-entero si j es semi-entero. Todos estos valores de m se presentan si se presenta uno de ellos.

Notas: los autovectores comunes a $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_z$, en general, tienen la forma $|k,j,m\rangle$, es decir,

$$\hat{\mathbf{J}}^2\,|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|k,j,m\rangle\ , \quad \hat{J}_z\,|k,j,m\rangle = m\hbar\,|k,j,m\rangle\,. \tag{2.2}$$

El índice k (discreto o continuo) se introduce para distinguir entre los diferentes autovectores correspondientes a los mismos autovalores $j(j+1)\hbar^2$ y $m\hbar$, de $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ (esto es así ya que, en general, estos dos operadores no constituyen un C.S.C.O.). Las relaciones de ortonormalización y de clausura satisfechas por estos autovectores vienen dadas por

$$\langle k,j,m \mid k',j',m'\rangle = \delta_{kk'}\,\delta_{jj'}\,\delta_{mm'}, \tag{2.3}$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{m=+j} \sum_{k=1}^{g(j)} |k,j,m\rangle\,\langle k,j,m| = \hat{1} \tag{2.4}$$

(suponiendo que el índice k es discreto). Usualmente se dice que estos $|k,j,m\rangle$ son una base estándar del espacio de estados $\mathcal{E}$. De hecho, la base formada por los autovectores comunes a $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_z$, $\{\,|k,j,m\rangle\,\}$, es una base estándar siempre que la acción de los operadores

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y \tag{2.5}$$

venga dada por

$$\hat{J}_\pm\,|k,j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\,|k,j,m\pm 1\rangle\,. \tag{2.6}$$

Intente demostrar la fórmula (2.6). Le daré a continuación algunas ayudas. Para demostrar (2.6) usted primero deberá demostrar que [$\hat{J}_-\,|k,j,m\rangle$ es autovector de $\hat{\mathbf{J}}^2$ con autovalor $j(j+1)\hbar^2$, y de $\hat{J}_z$ con autovalor $(m-1)\hbar$.]. De la misma forma, deberá demostrar que [$\hat{J}_+\,|k,j,m\rangle$ es autovector de $\hat{\mathbf{J}}^2$ con autovalor $j(j+1)\hbar^2$, y de $\hat{J}_z$ con autovalor $(m+1)\hbar$.]. (a) Por cierto, también note que

$$\|\,\hat{J}_-\,|k,j,m\rangle\,\|^2 = \langle k,j,m \mid \hat{J}_+\hat{J}_-\,|k,j,m\rangle \geq 0\,, \quad \|\,\hat{J}_+\,|k,j,m\rangle\,\|^2 = \langle k,j,m \mid \hat{J}_-\hat{J}_+\,|k,j,m\rangle \geq 0, \tag{2.7}$$

donde

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z\,, \quad \hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z. \tag{2.8}$$

Por lo tanto,

$$(j-m+1)(j+m) \geq 0\,, \quad (j-m)(j+m+1) \geq 0. \tag{2.9}$$

De estas desigualdades se obtiene el resultado $-j \leq m \leq +j$ ¡Demuéstrelo! (b) Demuestre las siguientes relaciones:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0\,, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm. \tag{2.10}$$

Calcule ahora la acción de $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ sobre el ket $\hat{J}_\pm\,|k,j,m\rangle$. Si lo ha hecho bien, concluirá que se pueden escribir las siguientes dos relaciones

$$\hat{J}_-\,|k,j,m\rangle = \mathrm{const}\,|k,j,m-1\rangle\ , \quad \hat{J}_+\,|k,j,m\rangle = \mathrm{const}\,|k,j,m+1\rangle\,. \tag{2.11}$$

(c) Encuentre el valor de las constantes en (2.11). Si lo ha hecho bien, habrá demostrado la fórmula

(2.6). (d) Compruebe que $\hat{J}_- \left|k, j, m = -j\right\rangle = 0$, y $\hat{J}_+ \left|k, j, m = +j\right\rangle = 0$.

3°) **Resumen de algunos resultados relacionados con un potencial central** Regrese al Hamiltoniano dado en la Ec. (1.9). (a) Suponga que el potencial $V(\mathbf{r})$ depende solo de la distancia r desde el origen a la partícula, es decir, el potencial es central. Demuestre que la parte radial de $\hat{H}$ también se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r\,\cdot\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right). \tag{3.1}$$

(b) Demuestre que el operador en (3.1) también se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r\,\cdot\right) = \frac{1}{2\mathrm{m}}\hat{p}_r^2, \tag{3.2}$$

donde

$$\hat{p}_r \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\cdot\right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right). \tag{3.3}$$

(c) Demuestre que el operador momentum radial $\hat{p}_r$ también puede escribirse de la siguiente manera:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{r}}{\mathrm{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\mathbf{r}}{\mathrm{r}}\right), \tag{3.4}$$

donde $\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$ es el operador momentum, y $\mathbf{r}$ es el vector posición (en coordenadas esféricas su módulo es $\mathrm{r} = r$). Ayuda: note que

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}r\hat{e}_r\cdot\nabla + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\frac{1}{r}r\hat{e}_r\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\hat{e}_r\cdot\nabla + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\hat{e}_r\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\hat{e}_r\right), \tag{3.5}$$

donde $\hat{e}_r$ es el vector unitario radial. Aplique la expresión (3.5) sobre una función arbitraria f y use la identidad $\nabla\cdot(c\mathbf{v}) = c\,\nabla\cdot\mathbf{v} + \mathbf{v}\cdot\nabla c$, donde c es un escalar y $\mathbf{v}$ es un vector. (d) Demuestre que el operador $\hat{p}_r$ es hermítico, es decir, demuestre que

$$0 = \langle\,\psi\mid\hat{p}_r\phi\,\rangle - \langle\,\hat{p}_r\psi\mid\phi\,\rangle, \tag{3.6}$$

donde $\psi = \psi(\mathbf{r})$ y $\phi = \phi(\mathbf{r})$ son funciones que pertenecen al espacio de Hilbert de las funciones de cuadrado integrable, pero además se debe cumplir que $\lim\limits_{r\to 0} r\psi(\mathbf{r}) = 0$, y también que las funciones sobre las cuales actúa $\hat{p}_r$ tienden a cero en el infinito. Ayuda: use la forma de $\hat{p}_r$ dada en (3.3). Nota: Es importante mencionar que el Hamiltoniano $\hat{H}$ dado en la Ec. (1.9) sí es auto-adjunto cuando las funciones sobre las cuales actúa satisfacen la condición de frontera $\lim\limits_{r\to 0} r\psi(\mathbf{r}) = 0$. (e) Lamentablemente, $\hat{p}_r$ es hermítico pero no es auto-adjunto. Incluso, a pesar de ser hermítico, este operador no tiene autofunciones ¡Demuéstrelo! (f) Demuestre que $\hat{p}_r$ satisface la relación $[r, \hat{p}_r] = \mathrm{i}\hbar$. (g) Usted podrá demostrar que si el potencial es central entonces $[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{L}}] = [\hat{H}, \hat{\boldsymbol{L}}^2] = 0$. Uno puede encontrar una base compuesta por autofunciones comunes a $\hat{H}$, $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ y $\hat{\mathcal{L}}_z$ (por ejemplo). Las autofunciones comunes tienen la forma $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ y la ecuación de autovalores para $\hat{H}$ es quien determina a la función radial $R(r)$. Halle la ecuación diferencial que debe satisfacer la función radial. (h) Se buscan soluciones de esta ecuación que tengan el siguiente comportamiento:

$$R(r) \approx \mathrm{const}\,\times\,r^s\,, \quad r\to 0, \tag{3.7}$$

mientras que el potencial es finito cuando $r \to 0$ (o mejor, $\lim_{r\to 0} rV(r) = 0$). Demuestre que es posible encontrar soluciones que satisfagan la condición (3.7) siempre que $s = +l$. En ese caso, se tiene que

$$R(r) \equiv R_{k,l}(r) \approx \text{const} \times r^{+l}\,, \quad r \to 0 \tag{3.8}$$

(el índice k, que puede ser discreto o continuo, indica los distintos autovalores asociados al mismo valor de l). (i) Haga el cambio

$$R_{k,l}(r) \equiv \frac{1}{r}\, u_{k,l}(r) \tag{3.9}$$

en la ecuación diferencial que obtuvo en (g) y halle la ecuación diferencial satisfecha por la función $u_l(r)$. Demuestre ahora que la condición dada en (3.8) se convierte en

$$u_{k,l}(r) \approx \text{const} \times r^{l+1}\,, \quad r \to 0. \tag{3.10}$$

Ya que l debe cumplir la desigualdad $l \geq 0$, se tiene entonces que la función $u_l(r)$ debe satisfacer la condición de frontera

$$u_{k,l}(r = 0) = 0. \tag{3.11}$$

Esta es la famosa condición llamada "condición de regularidad". La conclusión es que, si el potencial es radial, entonces las autofunciones tienen la forma

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r)\, Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{1}{r}\, u_{k,l}(r)\, Y_l^m(\theta,\phi). \tag{3.12}$$

(j) Demuestre que la condición de normalización para estas autofunciones se reduce a la relación

$$1 = \| \psi \|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\, |\, \psi_{k,l,m}(\mathbf{r})\, |^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2\, |\, R_{k,l}(r)\, |^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, |\, u_{k,l}(r)\, |^2\,. \tag{3.13}$$

Finalmente, las autofunciones del Hamiltoniano $\hat{H}$ para una partícula colocada en un potencial central $V(r)$ dependen de, al menos, tres índices, y simultaneamente también son autofunciones de los operadores $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ y $\hat{\mathcal{L}}_z$. Los respectivos autovalores son $E_{k,l}$, $l(l+1)\hbar^2$, y $m\hbar$. Usualmente, k es llamado el número cuántico radial; l es el número cuántico azimutal, y m es el número cuántico magnético.