(c) Rotações

$\mathbb{E}_3$ - Espaço Euclidiano - Rotações Clássicas

Considerando um vetor $\vec{K}$ no espaço tridimensional sendo rotacionado.

$$\vec{K}' = \vec{K} + \delta\vec{K} \tag{14.b}$$

Onde $\delta\vec{\omega} = \delta\theta\,\hat{n}$ e $\theta \ll 1$.

$$\delta\vec{K} = \delta\vec{\omega} \times \vec{K}$$
$$\delta K_i = \epsilon_{ijk}\,\delta\omega_j\,K_k$$
$$\delta K_i = \epsilon_{ijk}\,\delta\theta\,\hat{n}_j\,K_k \tag{14.c}$$

Outra Forma: Usando Matrizes

$$\vec{K}' = R^{\hat{n}}(\delta\theta)\,\vec{K}$$
$$K'_i = K_i + \epsilon_{ijk}\,\delta\theta\,\hat{n}_j\,K_k$$
$$K'_i = K_{ij}K_j$$

Uma das (infinitas) Representações dessa Rotação

$$I_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad I_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Para uma rotação quântica de um vetor $\vec{K}$ temos:

$$\vec{K} \to \vec{K}' = e^{-i\phi I_1} \cdot \vec{K} = R_1(\phi_1) \cdot \vec{K}$$

Espaço de Hilbert - Rotações Quânticas

$\mathcal{H}$: Espaço de Hilbert - Rotações Quânticas.
- R em $\mathbb{E}_3$ (rotações em $\mathbb{E}_3$ não comutam).
- $D(R)$ em $\mathcal{H}$ (representação da rotação no espaço de Hilbert).

Para duas rotações R_1 e R_2 em $\mathbb{E}_3$:

$$D(R_1R_2) \equiv D(R_1)D(R_2) \neq D(R_2)D(R_1)$$

$$D(R) = e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}} \tag{16}$$

$\hat{n}\cdot\vec{J}$ é a componente do momento angular na direção $\hat{n}$, onde $\vec{J}$ é o gerador da rotação em torno de $\hat{n}$.

Cálculos no Espaço Euclidiano ($\mathbb{E}_3$)

1. Para rotações infinitesimais, temos:

$$\vec{K}' = (1 - i\delta\phi_2 I_2 + \dots)(1 - i\delta\phi_1 I_1 + \dots)\vec{K}$$

$$\vec{K}'' = (1 - i\delta\phi_1 I_1 + \dots)(1 - i\delta\phi_2 I_2 + \dots)\vec{K}$$

$$\begin{aligned}\vec{K}'' - \vec{K}' &= -\delta\phi_1\delta\phi_2\,(I_1 I_2 - I_2 I_1)\,\vec{K} \\ &= -i\delta\phi_1\delta\phi_2 I_3\vec{K} + \psi(\delta\phi_3)\vec{K} \\ &= -i\delta\phi_1 i\delta\phi_2 I_3\vec{K} + \psi(\delta\phi^3)\vec{K}\end{aligned}$$

2. No espaço de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$\lim_{\delta\phi_i \to 0} \left(e^{-i\delta\phi_1 J_1} e^{-i\delta\phi_2 J_2} - e^{-i\delta\phi_2 J_2} \dots\right)$$

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$$

$$R \in \mathbb{E}_3 \longleftrightarrow D(R) = e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}} \in \mathcal{H}$$

$$\hat{A} \in \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad A' = D^{+}(R) A D(R)$$

No caso de uma rotação infinitesimal por $\delta\theta$:

$$A' = A + \delta A \tag{18b}$$

$$\begin{aligned}A + \delta A &= (1 + i\delta\theta\,\hat{n}\cdot\vec{J})A(1 - i\delta\theta\,\hat{n}\cdot\vec{J}) \\ &= A + i\delta\theta(\hat{n}\cdot\vec{J}A - A\hat{n}\cdot\vec{J}) \\ &= A + i\delta\theta\,[\hat{n}\cdot\vec{J}, A]\end{aligned}$$

Portanto,

$$\delta A = i\delta\theta[\hat{n}\cdot\vec{J}, A] \tag{18c}$$

Se $[\hat{n}\cdot\vec{J}, A] = 0$ para todo $\hat{n}$, então A é um escalar (ou seja, um operador que é invariante sob rotação).

Considere um observável $\hat{V} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3) \in \mathcal{H}$:

$$\vec{V}' \to \vec{V} = \vec{V} + \delta\vec{V} \tag{19}$$

Da mesma forma, para $\vec{K} \in \mathbb{E}_3$ sob uma rotação:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \delta\vec{K}$$

$$\delta\vec{K} = \delta\theta\,\hat{n} \times \vec{K}$$

Definição de Momento Angular em MQ (com $\hbar = 1$)

Considerando um conjunto de três operadores J_i (com $i = 1, 2, 3$) que obedecem à seguinte álgebra:

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$$

J^2 é um operador escalar, o que implica que:

$$[J^2, J_i] = 0 \quad \forall\, i$$

O conjunto de operadores $\{J^2, J_3\}$ define uma base de estados $\{|j, m\rangle\}$ tal que:

$$\langle jm|j'm'|jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

E os autovalores dos operadores J^2 e J_3 nos estados $|j, m\rangle$ são dados por:

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle$$

$$J_3 |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

onde j e m são reais, e os operadores J_i são hermitianos.

Sabemos que:

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$$

Definindo os operadores de subida e descida como:

$$J_+ = J_1 + iJ_2$$

$$J_- = J_1 - iJ_2$$

Esses operadores não são hermitianos e obedecem às seguintes relações de comutação:

$$[J_+, J_-] = 2J_3$$

$$[J_+, J_3] = -J_+$$

$$[J_-, J_3] = J_-$$

Portanto:

$$J_+J_- = J^2 - J_3(J_3 - 1)$$

$$J_-J_+ = J^2 - J_3(J_3 + 1)$$

$$[J_\pm, J^2] = 0$$

A condição para J^2 no estado $|j, m\rangle$ é:

$$\left\langle jm|J^2|jm\middle|jm|J^2|jm\right\rangle = |J\,|jm\rangle|^2 \geq 0$$

o que implica que:

$$j(j+1) \geq 0$$

Para o operador J_3:

$$\left\langle jm \middle| J^2 + J_3^2 \middle| jm \middle| jm \middle| J^2 + J_3^2 \middle| jm \right\rangle = \left\langle jm \middle| J^2 - J_3^2 \middle| jm \middle| jm \middle| J^2 - J_3^2 \middle| jm \right\rangle \geq 0$$

o que implica que:

$$j(j+1) - m^2 \geq 0$$

sabendo que j e m são reais.

Assim, m varia entre mín $\leq m \leq$ máx.

$$J_3 J_\pm |jm\rangle = (J_\pm J_3 \pm J_\pm) |jm\rangle$$
$$= (m \pm 1) J_\pm |jm\rangle$$

Logo, $J_\pm |jm\rangle$ é um autovetor de J_3 com autovalor $m \pm 1$.

$$J^2 J_\pm |jm\rangle = J_\pm J^2 |jm\rangle = (j(j+1)) J_\pm |jm\rangle$$

$J_\pm |jm\rangle$ é um autovalor de J^2 com autovalor $j(j+1)$.

$$J_\pm |jm\rangle = a_\pm |j, m \pm 1\rangle$$

Onde:

$$|a_\pm|^2 = \langle jm | J_\mp J_\pm | jm | jm | J_\mp J_\pm | jm \rangle$$
$$= \left\langle jm \middle| J^2 - J_3(J_3 \pm 1) \middle| jm \middle| jm \middle| J^2 - J_3(J_3 \pm 1) \middle| jm \right\rangle$$
$$= j(j+1) - m(m \pm 1)$$
$$a_\pm = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$$

Portanto:

$$J_\pm |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\, |j, m \pm 1\rangle$$

$$J_+ |j, \max\rangle = 0$$
$$J_- |j, \min\rangle = 0$$

Consequentemente:

$$j(j+1) = \max(\max + 1)$$
$$= \min(\min - 1)$$

Isso implica que:

$$\max(\max + 1) - \min(\min - 1) = 0$$
$$(\max + \min)(\max - \min + 1) = 0$$
$$\max = -\min = j$$

Portanto:

$$-j \leq m \leq j$$

Para algum k:

$$(J_+)^k |jm_0\rangle \propto |j, m_0 + k\rangle\,, \quad k \text{ é um número inteiro}$$

$$m_0 + k = \max = j \tag{1}$$

Para algum l:

$$(J_-)^l |jm_0\rangle \propto |j, m_0 - l\rangle\,, \quad l \text{ é um número inteiro}$$

$$m_0 - l = \min = -j \tag{2}$$

Subtraindo (2) de (1):

$$k + l = 2j, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$$

Assim, dado j, existem $2j + 1$ estados (multipletos).

Você não pode mudar j sob rotação, mas pode mudar suas componentes através da rotação. Fixando j, temos então um espaço de $(2j + 1)$ dimensões em $\mathcal{H}$.

J_i é uma representação de J.

O espectro de J_3 implica que os operadores de momento angular possuem duas propriedades importantes que são independentes da base:

1.

$$\sum_m{}' \langle jm|J_3|jm|jm|J_3|jm\rangle = 0 \quad \text{(claramente)}$$

Na verdade, isso é o traço:

$$\Rightarrow \mathrm{Tr}\{J_3\} = 0$$

$$D^j(R) J_3 D^j(R) = J_i$$

$$\mathrm{Tr}\ J_i = 0$$

2. Teorema de Cayley-Hamilton

$$M = M^+ \quad (n \times n), \quad \{\lambda_n\} \text{ são os autovalores}$$

$$\prod_i (M - \lambda_i) = 0$$

Definindo $M = J_3$:

$$U^+ J_3 U = J_i$$

$$\prod_{m=-j}^{j} (J_i - m) = 0$$

Qualquer operador em $\mathcal{H}_j$ que dependa do momento angular só pode ser escrito como um polinômio de grau $2j + 1$.

$$e^{-i\theta J_3} |jm\rangle = e^{-i\theta m} |jm\rangle$$

Para $\theta = 2\pi$:

$$|jm\rangle \to e^{-i2\pi m} |jm\rangle$$

Se j é inteiro: $|jm\rangle$ permanece o mesmo. Se j é semi-inteiro: $|jm\rangle$ muda para $-|jm\rangle$.

$$\langle\Psi|A|\Psi|\Psi|A|\Psi\rangle \text{ não muda!}$$

(a) Momento Angular Orbital

$$l = 0, 1, 2, \ldots \quad \Rightarrow \quad \{|lm\rangle\}$$

$$L^2 |lm\rangle = l(l+1) |lm\rangle$$

$$L_3 |lm\rangle = m |lm\rangle$$

$|r\rangle \equiv |r\,\theta\,\phi\rangle$, onde r é fixo e θ e ϕ variam (coordenadas polares).

$$\left\langle\phi|L^2|lm|\phi|L^2|lm\right\rangle = l(l+1) \langle\phi|lm|\phi|lm\rangle$$

$$\langle\phi|L_3|lm|\phi|L_3|lm\rangle = m \langle\phi|lm|\phi|lm\rangle$$

$\langle\phi|lm|\phi|lm\rangle = Y_{lm}(\theta, \phi)$, onde Y_{lm} são os harmônicos esféricos.

$$\int d\theta'\, d\phi'\, \sin\theta \,\langle\phi|L_3|\theta'\phi'\rangle\langle\theta'\phi'|lm\rangle = m\langle\phi|lm\rangle$$

Isso é trivial:

$$= \int d\theta' d\phi'\, \sin\theta'\, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi') \cdot Y_{lm}(\theta', \phi')$$

$$= mY_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{lm}(\theta, \phi) = mY_{lm}(\theta, \phi)$$

Equivalente a L^2:

$$= \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$= l(l+1)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\int d\Omega\, Y_{l'm'}(\Omega)Y_{lm}(\Omega) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad \text{(fator de normalização?)}$$

$$\int d\hat{n}\, Y_{l'm'}(\hat{n})Y_{lm}(\hat{n})$$

Onde $\Omega = (\theta, \phi)$ e $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\phi$.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m Y^*_{l,-m}(\theta, \phi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad m > 0$$

$$P_l^m(\cos\theta) = (1 - \cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta)$$