MECÂNICA QUÂNTICA I

LEFT – 3º ANO, 1º Sem (P1). (2021/2022)

SUMÁRIO:

Momento angular em MQ (Griff. 4.3, Gas. 7):

- Formalismo geral;
- Estados próprios do momento angular;
- Representação matricial;
- Funções próprias do momento angular.
- Spin (Griff. 4.4, Gas. 10-1)

DF
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
TÉCNICO LISBOA

Filipe Rafael Joaquim

Centro de Física Teórica de Partículas (CFTP) – DF -IST

filipe.joaquim@tecnico.ulisboa.pt , Ext: 3704 , Gab. 4-8.3

MOMENTO ANGULAR ORBITAL – Definições

O momento angular é uma quantidade importante porque está associado a transformações de rotação no espaço (ou espaços, para ser mais correcto… mas isso é outra história).

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (yp_z - zp_y)\vec{u}_x + (zp_x - xp_z)\vec{u}_y + (xp_y - yp_x)\vec{u}_z$$

MECÂNICA QUÂNTICA – OPERADOR MOMENTO ANGULAR ORBITAL

$$\boxed{\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{P}} = -i\hbar \hat{\vec{R}} \times \vec{\nabla}\ .}$$

$$\left.\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right) \\
\hat{L}_y &= \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar\left(\hat{Z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{X}\frac{\partial}{\partial z}\right) \\
\hat{L}_z &= \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\left(\hat{X}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y}\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned}\right]$$

O OPERADOR $\hat{L}^2$ É DEFINIDO POR:

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Estes operadores são todos hermíticos

MOMENTO ANGULAR ORBITAL – Relações de comutação

Vimos que as relações de comutação posição-momento são: $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar, \ [\hat{Y}, \hat{P}_y] = i\hbar, [\hat{Z}, \hat{P}_z] = i\hbar$

Relações de comutação para as componentes do momento angular

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \ \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] = [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}\hat{P}_x] - [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}\hat{P}_z] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x] + [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}\hat{P}_z] \\
&= \hat{Y}[\hat{P}_z, \hat{Z}]\hat{P}_x + \hat{X}[\hat{Z}, \hat{P}_z]\hat{P}_y = i\hbar(\hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x) = i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}
$$

Tendo em conta as definições dos operadores do slide anterior, podemos obter as outras duas relações de comutação. Então, as **relações de comutação do momento angular** são:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y.$$

As componentes do momento angular não comutam. **Logo, não as conseguimos medir simultaneamente com precisão arbitrária.**

Estas relações foram obtidas usando a representação dos operadores no espaço das posições. Mas como são relações de operadores, vão ser válidas em qualquer representação.

MOMENTO ANGULAR ORBITAL – Relações de comutação

$$[\hat{X},\ \hat{L}_x] = [\hat{X},\ \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y] = 0$$

$$\begin{aligned}
[\hat{X},\ \hat{L}_y] &= [\hat{X},\ \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] = [\hat{X},\ \hat{Z}\hat{P}_x] = \hat{Z}[\hat{X},\ \hat{P}_x] = i\hbar\hat{Z}, \\
[\hat{X},\ \hat{L}_z] &= [\hat{X},\ \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x] = -[\hat{X},\ \hat{Y}\hat{P}_x] = -\hat{Y}[\hat{X},\ \hat{P}_x] = -i\hbar\hat{Y}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{P}_x,\ \hat{L}_x] &= [\hat{P}_x,\ \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y] = 0, \\
[\hat{P}_x,\ \hat{L}_y] &= [\hat{P}_x,\ \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] = -[\hat{P}_x,\ \hat{X}\hat{P}_z] = -[\hat{P}_x,\ \hat{X}]\hat{P}_z = i\hbar\hat{P}_z \\
[\hat{P}_x,\ \hat{L}_z] &= [\hat{P}_x,\ \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x] = [\hat{P}_x,\ \hat{X}\hat{P}_y] = [\hat{P}_x,\ \hat{X}]\hat{P}_y = -i\hbar\hat{P}_y.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{X},\ \hat{\vec{L}}^2] &= [\hat{X},\ \hat{L}_x^2] + [\hat{X},\ \hat{L}_y^2] + [\hat{X},\ \hat{L}_z^2] \\
&= 0 + \hat{L}_y[\hat{X},\ \hat{L}_y] + [\hat{X},\ \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{X},\ \hat{L}_z] + [\hat{X},\ \hat{L}_z]\hat{L}_z \\
&= i\hbar(\hat{L}_y\hat{Z} + \hat{Z}\hat{L}_y - \hat{L}_z\hat{Y} - \hat{Y}\hat{L}_y), \\
[\hat{P}_x,\ \hat{\vec{L}}^2] &= [\hat{P}_x,\ \hat{L}_x^2] + [\hat{P}_x,\ \hat{L}_y^2] + [\hat{P}_x,\ \hat{L}_z^2] \\
&= 0 + \hat{L}_y[\hat{P}_x,\ \hat{L}_y] + [\hat{P}_x,\ \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{P}_x,\ \hat{L}_z] + [\hat{P}_x,\ \hat{L}_z]\hat{L}_z \\
&= i\hbar(\hat{L}_y\hat{P}_z + \hat{P}_z\hat{L}_y - \hat{L}_z\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{L}_y).
\end{aligned}$$

Vamos considerar um momento angular geral $\vec{J}$

(pode ser orbital, ou outro tipo de momento angular que possa vir a aparecer…
If you know what I mean…)

$$\boxed{[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z, \ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x, \ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y}$$

Já sabemos que como as componentes não comutam não as podemos medir simultaneamente com precisão arbitrária.

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

Operador escalar. J_x, J_y e J_z comutam com J^2 separadamente, mas não simultaneamente (as componentes não comutam entre si). Só uma das componentes pode ter estados próprios comuns aos de J^2. Vamos escolher J_z .

Vamos chamar $|\alpha, \beta\rangle$ aos estados próprios de J^2 e J_z, onde $\hbar^2\alpha$ e $\hbar\beta$ são, respetivamente, os seus valores próprios. α, β são são adimensionais ($\hbar$ tem dimensões de momento angular). Sendo assim:

$$\hat{\vec{J}}^2 \mid \alpha,\ \beta\rangle \ = \ \hbar^2\alpha \mid \alpha,\ \beta\rangle, \ \hat{J}_z \mid \alpha,\ \beta\rangle \ = \ \hbar\beta \mid \alpha,\ \beta\rangle$$

Vamos também considerar que estes estados são ortonormais:

$$\langle\alpha',\ \beta' \mid \alpha,\ \beta\rangle = \delta_{\alpha',\alpha}\delta_{\beta',\beta}$$

Temos agora que determinar os estados $|\alpha, \beta\rangle$. Para isso vamos usar um método semelhante ao que usámos para o oscilador harmónico.

Operadores de subida e descida do momento angular: $\longrightarrow$ $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \;\; \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

Pelo que podemos escrever:

$$\hat{J}_x^2 = \frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2), \;\; \hat{J}_y^2 = -\frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 - \hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2)$$

Usando as relações de comutação entre as componentes J_x, J_y e J_z:

$$\boxed{[\hat{\vec{J}}^2, \; \hat{J}_\pm] = 0, \;\; [\hat{J}_+, \; \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z, \;\; [\hat{J}_z, \; \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm}$$

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar\hat{J}_z = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z$$

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar\hat{J}_z = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z$$

$\longrightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\vec{J}}^2 &= \hat{J}_\pm\hat{J}_\mp + \hat{J}_z^2 \mp \hbar\hat{J}_z, \\ \hat{\vec{J}}^2 &= \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 \end{aligned}}$$

$[\hat{J}_z,\ \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm \longrightarrow$ Como não comutam, $|\alpha,\beta\rangle$ não são estados próprios de J_z e $J_\pm$.

Vamos fazer algo semelhante ao que fizemos para o oscilador harmónico:

$$\hat{J}_z(\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle) \xrightarrow[{[\hat{J}_z,\ \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm}]{} (\hat{J}_\pm\hat{J}_z \ \pm\ \hbar\hat{J}_\pm) \mid \alpha,\ \beta\rangle = \hbar(\beta \pm 1)(\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle)$$

$\Longrightarrow$ $(\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle)$ São auto-estados de J_z com valores próprios $\hbar(\beta \pm 1)$

$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \longrightarrow$ $|\alpha,\beta\rangle$ são estados próprios de J^2e $J_\pm$

$$\hat{\vec{J}}^2(\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle) = \hat{J}_\pm\hat{\vec{J}}^2 \mid \alpha,\ \beta\rangle = \hbar^2\alpha(\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle)$$

Ao atuar em $|\alpha,\beta\rangle$, $J_\pm$ não afetam o número quântico α, mas alteram β para $\beta \pm 1$. Então:

$$\hat{J}_\pm \mid \alpha,\ \beta\rangle = C^\pm_{\alpha\beta} \mid \alpha,\ \beta \pm 1\rangle$$

Onde $C^\pm_{\alpha\beta}$ será determinado mais tarde

Temos que determinar os intervalos de variação de α e β. Os elementos de matriz de $\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2$ são positivos. Então:

$$\langle \alpha,\ \beta \mid \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mid \alpha,\ \beta \rangle = \hbar^2(\alpha - \beta^2) \geq 0 \longrightarrow \alpha \geq \beta^2$$

$\boxed{\beta \text{ tem valor máximo } \beta_{max} \text{. Então: } \hat{J}_+ \mid \alpha,\ \beta_{max} \rangle = 0}$

Tendo em conta a relação: $\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$ temos:

$$(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) \mid \alpha,\ \beta_{max} \rangle = \hbar^2(\alpha - \beta_{max}^2 - \beta_{max}) \mid \alpha,\ \beta_{max} \rangle \longrightarrow \boxed{\alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + 1)}$$

Depois de n (não é o número quântico radial) aplicações sucessivas de J_- devemos atingir um valor de β_{min} de tal modo que $\hat{J}_-|\alpha, \beta_{min}\rangle = 0$. Tendo em conta:

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z \longrightarrow (\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z) \mid \alpha,\ \beta_{min} \rangle = 0 \longrightarrow \boxed{\alpha = \beta_{min}(\beta_{min} - 1)}$$

$\boxed{\text{Temos então que: } \beta_{max} = -\beta_{min}}$

MOMENTO ANGULAR – Formalismo geral

Como $|\alpha, \beta_{min}\rangle$ foi obtido após n aplicações sucessivas de J_- em $|\alpha, \beta_{max}\rangle = 0$ temos que:

$$\beta_{max} = \beta_{min} + n \xrightarrow{\beta_{max} = -\beta_{min}} \beta_{max} = \frac{n}{2}$$

β_{max} pode ser inteiro ou semi-inteiro dependendo se n é par ou impar.

Vamos chamar: $j = \beta_{max} = \dfrac{n}{2}, \quad m = \beta$

$$\alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + 1) \longrightarrow \alpha = j(j+1)$$

$$\beta_{max} = -\beta_{min} \longrightarrow -j \leq m \leq j$$

$$\hat{\vec{J}}^2 \,|\, \alpha,\ \beta\rangle = \hbar^2\alpha \,|\, \alpha,\ \beta\rangle, \longrightarrow \hat{\vec{J}}^2 \,|\, j,\ m\rangle = \hbar^2 j(j+1) \,|\, j,\ m\rangle$$

$$\hat{J}_z \,|\, \alpha,\ \beta\rangle = \hbar\beta \,|\, \alpha,\ \beta\rangle \longrightarrow \hat{J}_z \,|\, j,\ m\rangle = \hbar m \,|\, j,\ m\rangle$$

Os estados próprios de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ são os estados $|j, m\rangle$ onde $-j \leq m \leq j$ e j pode ser inteiro ou semi-inteiro.

A ortonormalidade dos estados implica: $\langle j',\ m' \mid j,\ m\rangle = \delta_{j',\,j}\delta_{m',\,m}$

$\hat{J}_{\pm} \mid \alpha,\ \beta\rangle = C^{\pm}_{\alpha\beta} \mid \alpha,\ \beta \pm 1\rangle \longrightarrow \hat{J}_{\pm} \mid j,\ m\rangle = C^{\pm}_{jm} \mid j,\ m \pm 1\rangle$

- Calculamos: $(\hat{J}_{+} \mid j,\ m\rangle)^{\dagger}\,(\hat{J}_{+} \mid j,\ m\rangle) \ = \ |C^{+}_{jm}|^2\langle j,\ m+1 \mid j,\ m+1\rangle = |C^{+}_{j\,m}|^2$

$$\left|C^{+}_{jm}\right|^2 \ = \ \langle j,\ m|\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} \mid j,\ m\rangle$$

$$C^{+}_{jm} = \sqrt{\langle j,\ m|\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z \mid j,\ m\rangle} = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

- Procedendo da mesma forma com $\hat{J}_{-}$ tem-se: $C^{-}_{jm} = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$

$$\hat{J}_{\pm} \mid j,\ m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\ \mid j,\ m \pm 1\rangle$$

ou

$$\hat{J}_{\pm} \mid j,\ m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\ \mid j,\ m \pm 1\rangle$$

Podemos agora ver como atuam $\hat{J}_{x,y}$ em $|j,m\rangle$

Tendo em conta as definições dadas no slide 6: $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$, $\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$

$$\begin{aligned}\hat{J}_x \mid j,\ m\rangle &= \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \mid j,\ m\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ \mid j,\ m+1\rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ \mid j,\ m-1\rangle\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{J}_y \mid j,\ m\rangle &= \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \mid j,\ m\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ \mid j,\ m+1\rangle - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ \mid j,\ m-1\rangle\right]\end{aligned}$$

É fácil de ver que os valores esperados são nulos:

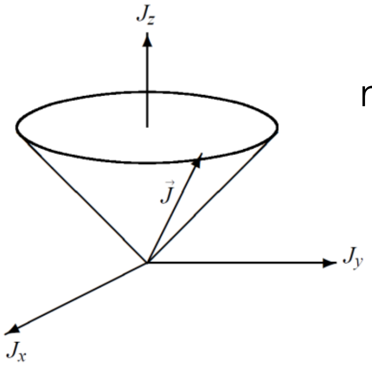
$$\langle j,\ m \mid \hat{J}_x \mid j,\ m\rangle = \langle j,\ m \mid \hat{J}_y \mid j,\ m\rangle = 0$$

Por outro lado:

$$\langle \hat{J}_x^2\rangle = \langle \hat{J}_y^2\rangle = \frac{1}{2}\Big[\langle j,\ m \mid \hat{\vec{J}}^2 \mid j,\ m\rangle - \langle j,\ m \mid \hat{J}_z^2 \mid j,\ m\rangle\Big] = \frac{\hbar^2}{2}\Big[j(j+1) - m^2\Big]$$

Como são as relações de incerteza?

MOMENTO ANGULAR – Representação geométrica

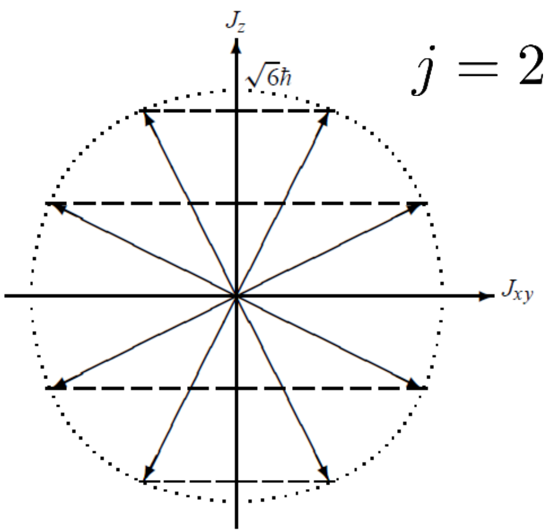


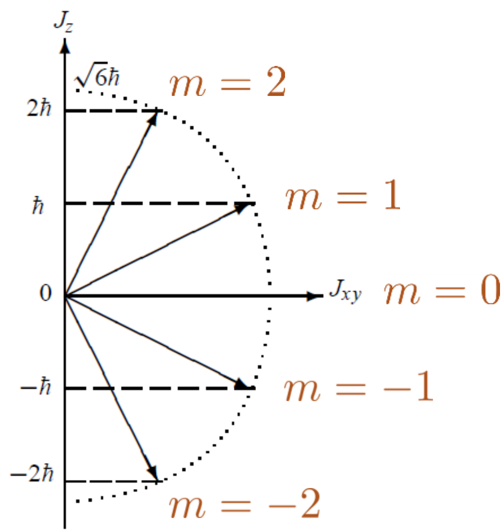
Vamos considerar a representação geométrica das componentes do momento angular para um determinado j. Podemos representar $\vec{J}$ como sendo um vetor de comprimento

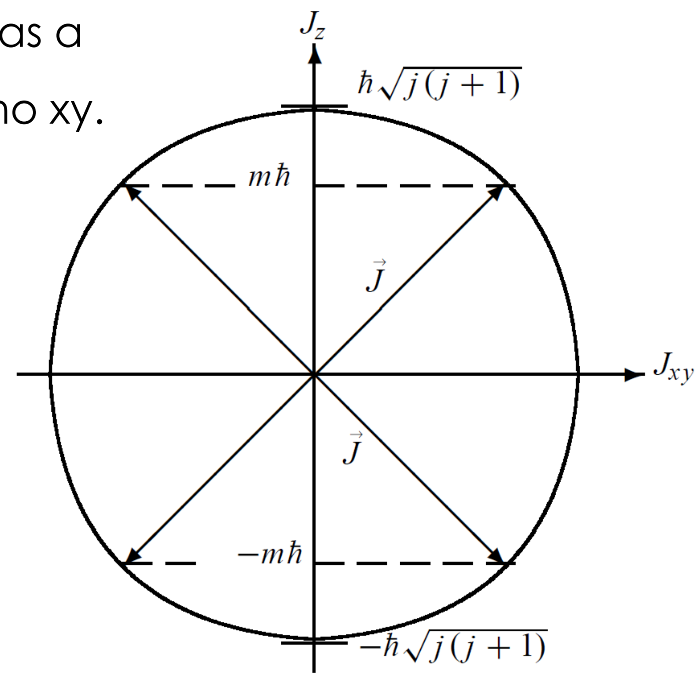
$$\sqrt{\langle \hat{\vec{J}}^2 \rangle} = \hbar\sqrt{j(j+1)}$$

A componente em z será tal que: $\langle \hat{J}_z \rangle = \hbar m$

- As componentes em x e y não estão definidas, apenas a soma dos quadrados. $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2$ está no plano xy.







MOMENTO ANGULAR – Representação matricial

Vamos considerar a representação matricial de operadores associados ao momento angular para um determinado j. Os estados $|j,m\rangle$ são estados próprios de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$. A base $\{|j,m\rangle\}$ é uma base completa. **A dimensão da base é $2j+1$. Logo, as representações matriciais serão dadas por matrizes $(2j+1)\times(2j+1)$.**

$$\sum_{m=-j}^{+j} |\, j,\ m\rangle\langle j,\ m\,| = \hat{I}$$

$$\langle j',\ m' \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, j,\ m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\delta_{j',\,j}\delta_{m',\,m}$$
$$\langle j',\ m' \,|\, \hat{J}_z \,|\, j,\ m\rangle = \hbar m\delta_{j',\,j}\delta_{m',\,m}.$$

Os operadores $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ têm representações diagonais. (como seria de esperar)

Alguns exemplos com representação não diagonais

$$\langle j',\ m' \,|\, \hat{J}_\pm \,|\, j,\ m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\ \delta_{j',\,j}\delta_{m',\,m\pm 1}$$

$$\langle j',\ m' \,|\, \hat{J}_x \,|\, j,\ m\rangle = \frac{\hbar}{2}\Big[\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\delta_{m',\,m+1} + \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\delta_{m',\,m-1}\Big]\delta_{j',\,j}$$

$$\langle j',\ m' | \hat{J}_y \,|\, j,\ m\rangle = \frac{\hbar}{2i}\Big[\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\delta_{m',\,m+1} - \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\delta_{m',\,m-1}\Big]\delta_{j',\,j}$$

MOMENTO ANGULAR – Exemplo ($j = 1$)

Vamos considerar o caso $j = 1 \rightarrow m = \pm 1, 0$.
A base é: $\{|1, m\rangle\} = \{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$

$$\hat{\vec{J}}^2 = \begin{pmatrix} \langle 1,\ 1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 1\rangle & \langle 1,\ 1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 0\rangle & \langle 1,\ 1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ -1\rangle \\ \langle 1,\ 0 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 1\rangle & \langle 1,\ 0 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 0\rangle & \langle 1,\ 0 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ -1\rangle \\ \langle 1,\ -1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 1\rangle & \langle 1,\ -1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ 0\rangle & \langle 1,\ -1 \,|\, \hat{\vec{J}}^2 \,|\, 1,\ -1\rangle \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matriz diagonal cujos elementos vão de $m\hbar$ a $-m\hbar$

Operadores de subida e descida

$$\boxed{\begin{gathered} \langle j',\ m' \,|\ \hat{J}_\pm \ |\, j,\ m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\,\delta_{j',\,j}\delta_{m',\,m\pm 1} \\ \hat{J}_- = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{J}_+ = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{gathered}}$$

Representação dos estados $|1, \pm 1\rangle$, $|1,0\rangle$

$$\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = m\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \longrightarrow |1,\ 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ |1,\ 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ |1,\ -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

MOMENTO ANGULAR – Exemplo $(j = 1)$

Usando esta representação para os estados, é fácil de ver que:

$$\langle 1,\ m' \mid 1,\ m\rangle = \delta_{m',\,m} \qquad (m', m = -1, 0, 1)$$

Além disso:

$$\sum_{m=-1}^{1} \mid 1,\ m\rangle\langle 1,\ m| = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}(0\ 0\ 1) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}(0\ 1\ 0) + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}(1\ 0\ 0) \ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Exemplo: ação do operador $\hat{J}_-$:

$$\hat{J}_-|1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle$$

Está obviamente de acordo com:

$$\hat{J}_\pm \mid j,\ m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\ \mid j,\ m\pm 1\rangle$$

Tendo em conta que:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \longrightarrow \hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Vamos agora considerar $\vec{J} = \vec{L}$ (momento angular orbital) sendo $j \equiv l$

$$\hat{\vec{L}}^2 \mid l,\ m\rangle = \hbar^2 l(l+1) \mid l,\ m\rangle, \ \hat{L}_z \mid l,\ m\rangle = \hbar m \mid l,\ m\rangle$$

$$\boxed{\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{P}} = -i\hbar \hat{\vec{R}} \times \vec{\nabla}\ .}$$

$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar\left(\hat{Z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{X}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\left(\hat{X}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y}\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$\longrightarrow$ **Em coordenadas esféricas:**

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right].$$

As funções próprias vão ser apenas função de θ e φ: $\langle\theta\varphi \mid l,\ m\rangle = Y_{lm}(\theta,\varphi)$

Tendo em conta o as propriedades do momento angular em MQ:

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)\ ,\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Como L_z depende só de φ: $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$

$$\hat{L}_z\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) = m\hbar\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) \longrightarrow -i\frac{\partial\Phi_m(\varphi)}{\partial\varphi} = m\Phi_m(\varphi)$$

Solução: $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \xrightarrow{\Phi_m(\varphi+2\pi)=\Phi_m(\varphi)} m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$

Temos então que: $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi}$

$$l_z = m\hbar, \quad m = -l, -(l-1), -(l-2), \ldots, 0, 1, 2, \ldots, l-2, l-1, l$$

Aplicamos $\hat{\vec{L}}^2$:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) &= \frac{-\hbar^2}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi}\\ &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{\sqrt{2\pi}}\Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi},\end{aligned}$$

Eliminando a dependência em φ:

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{lm}(\theta) = 0}$$

MOMENTO ANGULAR – Funções próprias de $\hat{\vec{L}}^2$

Aula 6: eq. angular para potenciais centrais

$$\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+\ell\left(\ell+1\right)\sin^2\theta=m^2$$

Mas a eq. que acabámos de obter é a mesma:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{lm}(\theta)=0$$

OS HARMÓNICOS ESFÉRICOS SÃO FUNÇÕES PRÓPRIAS DE $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$.

Logo o ℓ e m que introduzimos aquando da resolução da E.S. para potenciais centrais são os números quânticos do momento angular orbital.

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$
$Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$Y_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
$Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{\pm i\varphi}\sin\theta$
$Y_{20}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$
$Y_{2,\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}e^{\pm i\varphi}\sin\theta\cos\theta$
$Y_{2,\pm2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{\pm 2i\varphi}\sin^2\theta$

$$\sin\theta\cos\varphi=\frac{x}{r},\quad \sin\theta\sin\varphi=\frac{y}{r},$$

$$\cos\theta=\frac{z}{r}$$

$Y_{lm}(x,y,z)$
$Y_{00}(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$Y_{10}(x,y,z)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$
$Y_{1,\pm1}(x,y,z)=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm iy}{r}$
$Y_{20}(x,y,z)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2-r^2}{r^2}$
$Y_{2,\pm1}(x,y,z)=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm iy)z}{r^2}$
$Y_{2,\pm2}(x,y,z)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{x^2-y^2\pm 2ixy}{r^2}$

MOMENTO ANGULAR – Funções próprias de $\hat{\vec{L}}^2$

A função de onda de uma partícula em t=0 é: $\psi(x,y,z) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}}\frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} + \sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{xz}{r^2}$

Quais os valores de momento angular que a partícula pode ter e com que probabilidade?

Com o que acabámos de ver, podemos escrever a função de onda em termos de harmónicos esféricos:

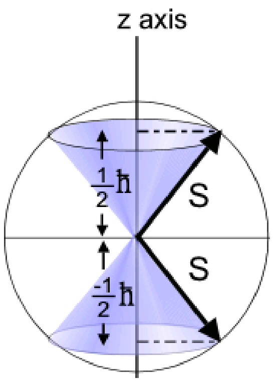
$$\psi(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{5}}Y_{20} + \sqrt{\frac{2}{5}}\left(Y_{2,-1} - Y_{21}\right)$$

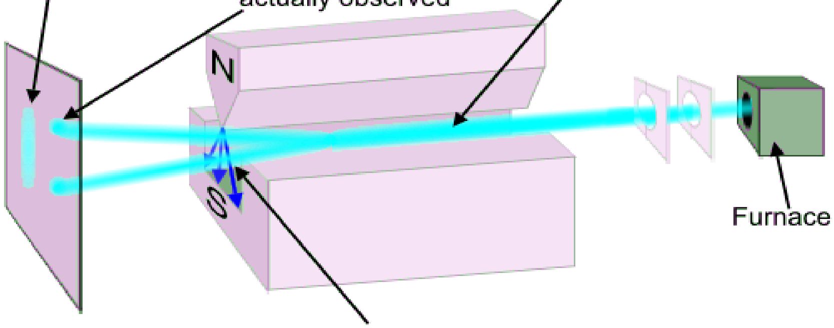
- Podemos ver que a partícula pode ter apenas $l = 2$ (probabilidade 100%).
- A partícula pode ter $L_z = -\hbar, 0, \hbar$ com probabilidades iguais a 2/5, 1/5 2 e 2/5 respetivamente

Experiência de Stern-Gerlach(1921)

Otto Stern

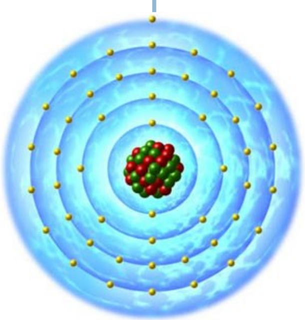
Walther Gerlach

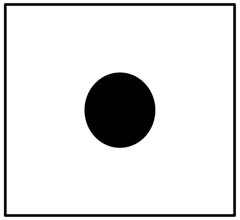


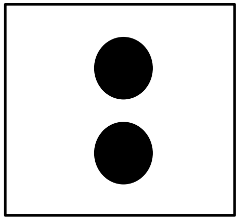


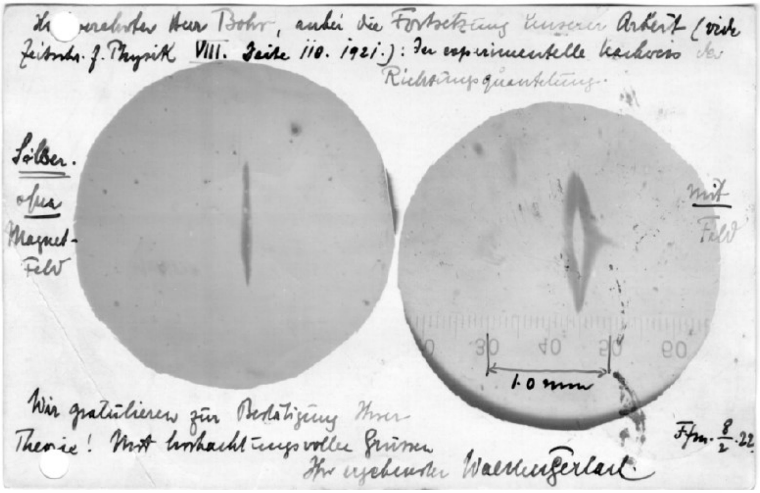
47	107.868
2163	1.4
961	
Ag	
[Kr]4d¹⁰5s	
10.5	1

Electrão 5s ($\ell = 0$)









"Attached the continuation of our work (Zeitschrift für Physik 8 (1921) 110): The experimental proof of directional quantisation. Silver without magnetic field / with magnetic field. We congratulate on the confirmation of your theory."
the postcard from Gerlach to Bohr, 8.02.1922

SPIN– Experiencia de Stern-Gerlach

- O facto de haver uma separação do feixe num conjunto discreto de componentes fornece uma confirmação adicional para a hipótese quântica do carácter discreto do mundo microfísico.

- Permite preparar estados quânticos com spin definido e determinar o momento angular total dos átomos.

ALGEBRA DO SPIN: $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z,\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x,\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$

Estados próprios:

$$\hat{\vec{S}}^{\,2} \mid s,\ m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) \mid s,\ m_s\rangle, \qquad \hat{S}_z \mid s,\ m_s\rangle = \hbar m_s \mid s,\ m_s\rangle$$

$$m_s = -s, -s+1, \ldots, -s+1, s$$

- $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \longrightarrow \hat{S}_\pm \mid s,\ m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}\ \mid s,\ m_s \pm 1\rangle$

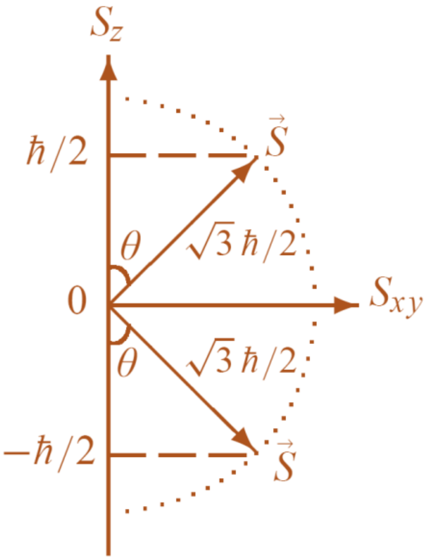
- $\langle \hat{A}\rangle = \langle s,\ m_s|\hat{A} \mid s,\ m_s\rangle \longrightarrow \langle \hat{S}_x^2\rangle = \langle \hat{S}_y^2\rangle = \frac{1}{2}(\langle \hat{\vec{S}}^2\rangle - \langle \hat{S}_z^2\rangle) = \frac{\hbar^2}{2}\left[s(s+1) - m_s^2\right]$

- **Base completa:** $\langle s',\ m_s' \mid s,\ m_s\rangle = \delta_{s',s}\delta_{m_s',m_s},\quad \sum_{m_s=-s}^{s} \mid s,\ m_s\rangle\langle s,\ m_s \mid = I$

SPIN ½ (s=1/2): $m_s = -\frac{1}{2}$ and $\frac{1}{2}$ $\longrightarrow$ $|\, s,\ m_s\rangle = \left|\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right\rangle$ and $\left|\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right\rangle$

Estados próprios: $|1/2, 1/2\rangle \equiv |+\rangle \equiv |\uparrow\rangle\ ,\ |1/2, -1/2\rangle \equiv |-\rangle \equiv |\downarrow\rangle$

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{\vec{S}}^{\,2}\,|\, s,\ m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)\,|\, s,\ m_s\rangle \longrightarrow \hat{\vec{S}}^2\left|\frac{1}{2},\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|\frac{1}{2},\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle \\ \hat{S}_z\,|\, s,\ m_s\rangle = \hbar m_s\,|\, s,\ m_s\rangle \longrightarrow \hat{S}_z\left|\frac{1}{2},\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\left|\frac{1}{2},\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle \end{array}}$$



Representação matricial:

$$\hat{\vec{S}}^2 = \begin{pmatrix} \langle\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\,|\,\hat{\vec{S}}^2\,|\,\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\rangle & \langle\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\,|\,\hat{\vec{S}}^2\,|\,\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\rangle \\ \langle\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\,|\,\hat{\vec{S}}^2\,|\,\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\rangle & \langle\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\,|\,\hat{\vec{S}}^2|\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{próprios}]{\text{Estados}} \left|\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ \left|\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

$$\hat{S}_x = \tfrac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \text{ and } \hat{S}_y = \tfrac{i}{2}(\hat{S}_- - \hat{S}_+) \longrightarrow \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

SPINORES $\longrightarrow$ $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |+\rangle \equiv |\uparrow\rangle, \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |-\rangle \equiv |\downarrow\rangle$

Estados próprios de $\hat{S}_x$ e $\hat{S}_y$

$$|\psi_x\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \pm \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right],$$

$$|\psi_y\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \pm i\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

$$\hat{S}_x|\psi_x\rangle_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}|\psi_x\rangle_\pm, \quad \hat{S}_y|\psi_y\rangle_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}|\psi_y\rangle_\pm$$

Ortonormalidade dos estados próprios

$$\left\langle\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = (1 \;\; 0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1,$$

$$\left\langle\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = (0 \;\; 1)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1,$$

$$\left\langle\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \left\langle\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

Definimos: $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ $\xrightarrow[\text{Pauli}]{\text{Matrizes de}}$ $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\sigma_j^2 = \hat{I} \qquad (j = x, y, z),$$

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 0 \qquad (j \neq k),$$

Relações de comutação: $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\,\varepsilon_{jkl}\sigma_l$

Relações de anti-comutação: $\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\hat{I}\delta_{j,k}$

- $[\hat{S}_j,\ \hat{L}_k] = 0, \qquad [\hat{S}_j,\ \hat{R}_k] = 0, \qquad [\hat{S}_j,\ \hat{P}_k] = 0 \qquad (j,k = x,y,z).$
- A função de onda total contém uma parte de spin: $|\,\Psi\rangle = |\,\psi\rangle\,|\,s,\ m_s\rangle$
- Ex: Potenciais centrais: $\Psi_{nlm_lm_s}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})\,|\,s,\ m_s\rangle$

Exemplo:

Partícula de spin ½ sujeita a um potencial central.

$$\Psi_{nlm_l\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_{nlm_l}(\vec{r})\\0\end{pmatrix}$$

$$\Psi_{nlm_l-\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\psi_{nlm_l}(\vec{r})\end{pmatrix}$$

EXEMPLO: Um electrão encontra-se num estado de spin $|\chi\rangle = A\begin{pmatrix}1-2i\\2\end{pmatrix}$.

(a) Determinar a constante A de modo a normalizar $|\chi\rangle$

$$\langle\chi|\chi\rangle = 1 \rightarrow |A|^2(|1-2i|^2+4) = 1 \rightarrow 9|A|^2 = 1 \rightarrow A = 1/3 \longrightarrow |\chi\rangle = \frac{1}{3}\begin{pmatrix}1-2i\\2\end{pmatrix}$$

(b) Se se medir S_z, quais os valores que se podem obter e com que probabilidade?

$$|\chi\rangle = \frac{1-2i}{3}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \frac{2}{3}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1-2i}{3}|\uparrow\rangle + \frac{2}{3}|\downarrow\rangle \longrightarrow \left\{\begin{array}{l} P_{S_z=1/2} = \left|\frac{1-2i}{3}\right|^2 = 5/9 \\ P_{S_z=-1/2} = \left|\frac{2}{3}\right|^2 = 4/9 \end{array}\right.$$

(c) Qual o valor esperado de $\hat{S}_z$.

$$\boxed{\langle\chi| = \frac{1+2i}{3}\langle\uparrow| + \frac{2}{3}\langle\downarrow|\,,\quad \hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle,\quad \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle}$$

$$\langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle = \left(\frac{1+2i}{3}\langle\uparrow| + \frac{2}{3}\langle\downarrow|\right)\hat{S}_z\left(\frac{1-2i}{3}|\uparrow\rangle + \frac{2}{3}|\downarrow\rangle\right)$$

$$= \left|\frac{1+2i}{3}\right|^2\langle\uparrow|\hat{S}_z|\uparrow\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^2\langle\downarrow|\hat{S}_z|\downarrow\rangle = \frac{5}{9}\frac{\hbar}{2}\langle\uparrow|\uparrow\rangle + \frac{4}{9}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\langle\downarrow|\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{18}$$

(b) Se se medir S_x, quais os valores que se podem obter e com que probabilidade?

Estados próprios de $\hat{S}_x$ e $\hat{S}_y$

$$|\psi_x\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \pm \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right],$$

$$|\psi_y\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \pm i\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

$$\hat{S}_x|\psi_x\rangle_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}|\psi_x\rangle_\pm,\quad \hat{S}_y|\psi_y\rangle_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}|\psi_y\rangle_\pm$$

$\longrightarrow$

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle)$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle)$$

$$\hat{S}_x|\pm\rangle_x = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_x$$

$$\hat{S}_y|\pm\rangle_y = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_y$$

$$P_{s_x=\pm 1/2} = |{}_x\langle \pm|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\uparrow| \pm \langle\downarrow|)\left(\frac{1-2i}{3}|\uparrow\rangle + \frac{2}{3}|\downarrow\rangle\right)\right|^2 = \frac{1}{2}\left|\frac{1-2i}{3} \pm \frac{2}{3}\right|^2$$

$$\boxed{P_{s_x=+1/2} = \frac{13}{18} \quad , P_{s_x=-1/2} = \frac{5}{18}}$$

EXEMPLO: Determine os níveis de energia de uma partícula de spin 3/2 cujo Hamiltoniano é:

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - 2\hat{S}_z^2) - \frac{\beta}{\hbar}\hat{S}_z$$

onde α, β são constantes.

Resolução: Antes de nos metermos por caminhos pantanosos convém olharmos para o Hamiltoniano e ver se não podemos simplificar a vida.

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \longrightarrow \hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2}\left(\hat{\vec{S}}^2 - 3\hat{S}_z^2\right) - \frac{\beta}{\hbar}\hat{S}_z$$

Os estados próprios de $\hat{H}$ vão ser os estados próprios de $\hat{S}_z$ e $\hat{S}^2$

$$\hat{\vec{S}}^{\,2} \mid s,\ m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) \mid s,\ m_s\rangle$$

$$\hat{S}_z \mid s,\ m_s\rangle = \hbar m_s \mid s,\ m_s\rangle$$

Neste caso $s = \frac{3}{2}$, logo:

$$m_s = -\frac{3}{2},\ -\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{2}$$

$$\hat{H} \mid s,\ m_s\rangle = \frac{\alpha}{\hbar^2}\left[\hbar^2 s(s+1) - 3\hbar^2 m_s^2\right] \mid s,\ m_s\rangle - \frac{\beta}{\hbar}\hbar m_s \mid s,\ m_s\rangle$$

$$= \frac{15}{4}\alpha - m_s(3\alpha m_s + \beta) \mid s,\ m_s\rangle$$

Elementos de matriz: $\langle s,\ m_s \mid \hat{H} \mid s,\ m_s\rangle = \frac{15}{4}\alpha - m_s(3\alpha m_s + \beta)$

$$\boxed{E_m = \frac{15}{4}\alpha - m_s(3\alpha m_s + \beta) \quad , \quad m_s = -\frac{3}{2},\ -\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{2}}$$