Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Soluções

Exercício 1: *Relações de comutação entre as coordenadas ou o momento e o momento angular*

a) Temos

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{C}\hat{D}] &= \hat{A}\hat{C}\hat{D} - \hat{C}\hat{D}\hat{A} \\ &= \hat{A}\hat{C}\hat{D} - \hat{C}\hat{A}\hat{D} + \hat{C}\hat{A}\hat{D} - \hat{C}\hat{D}\hat{A} \\ &= (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{D} + \hat{C}(\hat{A}\hat{D} - \hat{D}\hat{A}) \\ &= [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\,. \end{aligned} \tag{1}$$

b) Temos

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= -[\hat{C}, \hat{A}\hat{B}] \\ &= -[\hat{C}, \hat{A}]\hat{B} - \hat{A}[\hat{C}, \hat{B}] \\ &= [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\,, \end{aligned} \tag{2}$$

utilizando o resultado (1) e a anti-simetria do comutador.

c) Substituindo a definição

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jlm}\hat{x}_l\hat{p}_m\,, \tag{3}$$

do momento angular orbital no comutador desta quantidade com a coordenada

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{L}_j] &= \varepsilon_{jkl}[\hat{x}_i, \hat{x}_k\hat{p}_l] \\ &= \varepsilon_{jkl}[\hat{x}_i, \hat{x}_k]\hat{p}_l + \varepsilon_{jkl}\hat{x}_k[\hat{x}_i, \hat{p}_l] \\ &= i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{x}_k\delta_{il} = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k\,, \end{aligned} \tag{4}$$

onde a convenção de soma de Einstein é assumida, se utilizou o resultado (1), a relação de comutação $[\hat{x}_i, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{il}$, e a invariância cíclica do símbolo de permutação. Note-se que na equação (4), escrevemos $\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl}\hat{x}_k\hat{p}_l$, contrariamente acima, porque os índices k, l ou l, m são índices mudos nesta definição.

d) Analogamente à alínea anterior, temos

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{L}_j] &= \varepsilon_{jkl}[\hat{p}_i, \hat{x}_k\hat{p}_l] \\ &= \varepsilon_{jkl}[\hat{p}_i, \hat{x}_k]\hat{p}_l + \varepsilon_{jkl}\hat{x}_k[\hat{p}_i, \hat{p}_l] \\ &= -i\hbar\varepsilon_{jkl}\delta_{ik}\hat{p}_l = -i\hbar\varepsilon_{jil}\hat{p}_l = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\,, \end{aligned} \tag{5}$$

onde a convenção de soma de Einstein é assumida, se utilizou o resultado (1), a relação de comutação $[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = -i\hbar\delta_{ik}$, a antisimetria do símbolo de permutação, e se renomeou $l \to k$ na última linha, uma vez que este índice é mudo.

Repare-se que a relação de comutação com o momento angular $[\hat{A}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k$ caracteriza um operador vetorial e é válida para o próprio momento angular (um pseudo-vector), como veremos abaixo.

e) Temos $\hat{p}^2 = \hat{p}_i\hat{p}_i$. Substituindo

$$\begin{aligned}
[\hat{p}^2, \hat{L}_j] &= [\hat{p}_i\hat{p}_i, \hat{L}_j] = \hat{p}_i[\hat{p}_i, \hat{L}_j] + [\hat{p}_i, \hat{L}_j]\hat{p}_i \\
&= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_i\hat{p}_k + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\hat{p}_i \\
&= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_i\hat{p}_k + i\hbar\varepsilon_{kji}\hat{p}_i\hat{p}_k = 0\,,
\end{aligned} \tag{6}$$

onde usamos o resultado (5) e onde renomeamos $i \leftrightarrow k$ no segundo termo da última linha, dado que se trata de índices mudos, e se usou $\varepsilon_{kji} = -\varepsilon_{ijk}$.

f) Basta substituir $\hat{p}_i \to \hat{x}_i$ na demonstração acima, dado que as relações de comutação das coordenadas com o momento angular são idênticas às do momento linear.

g) Demonstramos o resultado para $n = 1$ na alínea anterior. Suponhamos que é válido para $n > 1$. Então temos

$$[\hat{r}^{2n+2}, \hat{L}_j] = [\hat{r}^{2n}, \hat{L}_j]\hat{r}^2 + \hat{r}^{2n}[\hat{r}^2, \hat{L}_j] = 0\,, \quad n > 1 \tag{7}$$

onde usamos o resultado (2).

Para um potencial, $V(\hat{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\,\hat{r}^{2n}$, que seja uma função analítica de $\hat{r}^2$, temos $[V(\hat{r}), \hat{L}_j] = 0$, dado que cada termo da expansão comuta com qualquer das componentes do momento angular. Como $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$, e já vimos que ambos os termos, a energia cinética e potencial, comutam com as componentes do momento angular, temos $[\hat{H}, \hat{L}_j] = 0$, o que quer dizer que os valores médios de $\hat{L}_j$, em qualquer estado que é uma solução da equação de Schrödinger (in-)dependente do tempo com este Hamiltoniano, são conservados.

Evidentemente, esta demonstração não é válida para o potencial de Coulomb, porque este não é uma função analítica de $\hat{r}^2$. Para provar que comuta com as componentes do momento angular, é necessário escrevê-las em coordenadas esféricas e mostrar que não dependem de r (ver abaixo).

h) Temos, substituindo a definição de $\hat{L}_j$ no comutador entre diferentes componentes do momento angular

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \varepsilon_{ilm}[\hat{x}_l\hat{p}_m, \hat{L}_j] \\
&= \varepsilon_{ilm}([\hat{x}_l, \hat{L}_j]\hat{p}_m + \hat{x}_l[\hat{p}_m, \hat{L}_j]) \\
&= i\hbar\varepsilon_{ilm}(\varepsilon_{ljk}\hat{x}_k\hat{p}_m + \varepsilon_{mjk}\hat{x}_l\hat{p}_k) \\
&= i\hbar(\varepsilon_{mil}\varepsilon_{jkl}\hat{x}_k\hat{p}_m + \varepsilon_{ilm}\varepsilon_{jkm}\hat{x}_l\hat{p}_k) \\
&= i\hbar[(\delta_{mj}\delta_{ik} - \delta_{mk}\delta_{ij})\hat{x}_k\hat{p}_m + (\delta_{ij}\delta_{lk} - \delta_{ik}\delta_{lj})\hat{x}_l\hat{p}_k] \\
&= i\hbar(\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i)\,,
\end{aligned} \tag{8}$$

onde utilizamos a relação (2) e a equação

$$\varepsilon_{ilm}\varepsilon_{jnm} = \delta_{ij}\delta_{ln} - \delta_{in}\delta_{lj}\,, \tag{9}$$

assim como a invariância de permutação do símbolo ε_{ijk}.

Se considerarmos agora o operador $i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$ e aplicarmos novamente a equação (9), obtemos

$$\begin{aligned}
i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\hat{x}_l\hat{p}_m = i\hbar\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lmk}\hat{x}_l\hat{p}_m \\
&= i\hbar(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})\hat{x}_l\hat{p}_m \\
&= i\hbar(\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i)\,,
\end{aligned} \tag{10}$$

que é o resultado dado em (8). A identidade está assim demonstrada.

Exercício 2: *Operador momento angular em coordenadas esféricas*

As coordenadas cartesianas (x, y, z) estão relacionadas com as coordenadas esféricas (r, θ, φ), através das fórmulas

$$x = r\sin\theta\cos\varphi\,, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi\,, \quad z = r\cos\theta\,. \tag{11}$$

a) Utilizando a relação entre as coordenadas cartesianas e as coordenadas esféricas, obtemos os seguintes vetores tangentes às linhas coordenadas, $\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_\mu}$, onde $\boldsymbol{r} = x\hat{\boldsymbol{e}}_x + y\hat{\boldsymbol{e}}_y + z\hat{\boldsymbol{e}}_z$ e $q_\mu = (r, \theta, \varphi)$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial r} &= \sin\theta\cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin\theta\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y + \cos\theta\hat{\boldsymbol{e}}_z\,,\\
\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \theta} &= r(\cos\theta\cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + \cos\theta\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y - \sin\theta\hat{\boldsymbol{e}}_z)\,,\\
\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \varphi} &= r\sin\theta(-\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + r\cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y)\,.
\end{aligned}$$

O módulo destes vetores é

$$\begin{aligned}
h_r = \left\|\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial r}\right\| &= 1\,,\\
h_\theta = \left\|\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \theta}\right\| &= r\,,\\
h_\varphi = \left\|\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \varphi}\right\| &= r\sin\theta\,,
\end{aligned}$$

e os vetores normados $\hat{\boldsymbol{e}}_\mu$ são dados por

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{e}}_r &= \sin\theta\cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin\theta\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y + \cos\theta\hat{\boldsymbol{e}}_z\,,\\
\hat{\boldsymbol{e}}_\theta &= \cos\theta\cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + \cos\theta\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y - \sin\theta\hat{\boldsymbol{e}}_z\,,\\
\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi &= -\sin\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_x + \cos\varphi\hat{\boldsymbol{e}}_y\,.
\end{aligned}$$

Num sistema de coordenadas ortonormado, o gradiente de uma função ψ pode ser escrito como

$$\nabla\psi = \sum_\mu (\nabla\psi)_\mu \hat{\boldsymbol{e}}_\mu\,,$$

onde a componente ao longo de $\hat{\boldsymbol{e}}_\mu$ é dada por $(\nabla\psi)_\mu = \nabla\psi \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_\mu$. Utilizando a relação $\hat{\boldsymbol{e}}_\mu = \frac{1}{h_\mu}\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_\mu}$ na expressão para $(\nabla\psi)_\mu$, obtemos

$$\begin{aligned}
(\nabla\psi)_\mu &= \frac{1}{h_\mu}(\nabla\psi)\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_\mu}\\
&= \frac{1}{h_\mu}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial q_\mu}\\
&= \frac{1}{h_\mu}\frac{\partial\psi}{\partial q_\mu}\,,
\end{aligned}$$

onde utilizamos a regra da cadeia. Podemos, portanto, utilizando as expressões para h_μ obtidas acima para as coordenadas esféricas, escrever o gradiente de uma função nestas coordenadas, como

$$\begin{aligned}
\nabla\psi &= \sum_\mu \frac{1}{h_\mu}\frac{\partial\psi}{\partial\mu}\hat{\boldsymbol{e}}_\mu \\
&= \frac{\partial\psi}{\partial r}\hat{\boldsymbol{e}}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\hat{\boldsymbol{e}}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi\,, \qquad (12)
\end{aligned}$$

que é o resultado dado na folha de exercícios.

b) Na representação de posição e em coordenadas esféricas $\hat{\boldsymbol{r}} = r\hat{\boldsymbol{e}}_r$ and $\hat{\boldsymbol{p}}$ é dado por

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\left(\hat{\boldsymbol{e}}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\boldsymbol{e}}_\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,,$$

como se pode ver pela equação (12).

Como o triedo $\hat{\boldsymbol{e}}_r, \hat{\boldsymbol{e}}_\theta, \hat{\boldsymbol{e}}_\varphi$ é direto, temos $\hat{\boldsymbol{e}}_r \times \hat{\boldsymbol{e}}_r = \boldsymbol{0}$, $\hat{\boldsymbol{e}}_r \times \hat{\boldsymbol{e}}_\theta = \hat{\boldsymbol{e}}_\varphi$ e $\hat{\boldsymbol{e}}_r \times \hat{\boldsymbol{e}}_\varphi = -\hat{\boldsymbol{e}}_\theta$.

Substituindo estas expressões para $\hat{\boldsymbol{r}}$ e $\hat{\boldsymbol{p}}$ em $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$, obtemos

$$\hat{\boldsymbol{L}} = -i\hbar\left(\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\hat{\boldsymbol{e}}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,.$$

Tomando agora o produto escalar deste operador com os versores da base cartesiana $\hat{\boldsymbol{e}}_x, \hat{\boldsymbol{e}}_y, \hat{\boldsymbol{e}}_z$ e lendo as componentes de $\hat{\boldsymbol{e}}_\theta$ e $\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi$ nessa base, conforme escrito acima, de modo a calcular o produto escalar entre $\hat{\boldsymbol{e}}_x, \hat{\boldsymbol{e}}_y, \hat{\boldsymbol{e}}_z$ e $\hat{\boldsymbol{e}}_\theta$ e $\hat{\boldsymbol{e}}_\varphi$, obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,, \\
\hat{L}_y &= -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,, \\
\hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\,. \qquad (13)
\end{aligned}$$

como é dado na folha de exercícios. Note que estes operadores não dependem de r e por isso comutam com qualquer potencial que seja apenas função desta coordenada, como seria de esperar.

c) Considerando as combinações lineares $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ e utilizando as expressões dadas acima, obtemos

$$\hat{L}_\pm = \pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,. \qquad (14)$$

d) Os harmónicos esféricos $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ são autofunções do operador de momento angular orbital $\hat{L}_z$, isto é $\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi)$, onde m é um inteiro, como demonstrado na aula teórica. Também são autofunções do operador de momento angular total $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$, de valor próprio $\hbar^2 l(l+1)$ em que l é um inteiro $l \geq 0$ e $-l \leq m \leq l$, ou seja, o valor próprio de $\hat{L}_z$ está compreendido entre $-l$ e l.

Sabemos ainda que para $m = l$, $\hat{L}_+ Y_{ll}(\theta,\varphi) = 0$ (resp. $\hat{L}_- Y_{l-l}(\theta,\varphi) = 0$). Utilizando a expressão para $\hat{L}_+$ em coordenadas esféricas dada acima, obtemos

$$\frac{\partial Y_{ll}}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial Y_{ll}}{\partial\varphi} = 0\,. \tag{15}$$

Substituindo nesta equação $Y_{ll}(\theta,\varphi) = c_l(\sin\theta)^l\, e^{il\varphi}$, onde c_l é uma constante de normalização e efetuando as derivações, é fácil verificar que esta função se trata de facto de uma solução da dita equação.

e) Integrando o módulo quadrado de $Y_{ll}(\theta,\varphi)$ sobre o ângulo sólido da esfera, obtemos da condição de normalização desta função

$$\begin{aligned} 1 &= \int d\Omega \mid Y_{ll}(\theta,\varphi) \mid^2 \\ &= |c_l|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta\,(\sin\theta)^{2l} \\ &= 2\pi\,|c_l|^2 \int_0^{\pi} d\theta\,(\sin\theta)^{2l+1}\,, \end{aligned}$$

o que determina c_l a menos de um factor de fase. Utilizando a substituição de variável, $u = \cos\theta$, nesta equação, obtemos

$$\begin{aligned} 1 &= 2\pi\,|c_l|^2 \int_{-1}^{1} du\,(1-u^2)^l \\ &= 2\pi\,|c_l|^2 \int_{-1}^{1} du\,(1+u)^l(1-u)^l \\ &= 4\pi\,|c_l|^2\,2^{2l} \int_0^1 dv\,v^l(1-v)^l\,, \end{aligned}$$

onde efetuamos a substituição de variável $v = \frac{1}{2}(1+u)$ ao passar da segunda para a terceira linha. Escrevendo agora o integral acima como

$$\begin{aligned} \int_0^1 dv\,v^l(1-v)^l &= l\int_0^1 dv\,v^l \int_v^1 dx\,(1-x)^{l-1} \\ &= l\int_0^1 dx\,(1-x)^{l-1} \int_0^x dv\,v^l \\ &= \frac{l}{l+1}\int_0^1 dx\,(1-x)^{l-1}\,x^{l+1} \\ &= \frac{l}{l+1}\int_0^1 dv\,v^{l+1}\,(1-v)^{l-1}\,, \end{aligned}$$

onde substituimos $x \to v$ na última linha e onde trocamos o domínio de integração entre v e x (esta identidade pode ser demonstrada integrando por partes). Se utilizarmos este artifício de cálculo $l-1$ vezes, obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^1 dv\,v^l(1-v)^l &= \frac{l\ldots 1}{(l+1)\ldots(2l)}\int_0^1 dv\,v^{2l} \\ &= \frac{l!\,l!}{(2l+1)!}\,. \end{aligned}$$

Substituindo este resultado acima, obtemos $|c_l| = \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$. Finalmente, considerando a fase de c_l como sendo igual a $l\pi$ (por convenção), obtemos

$$c_l = \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}e^{il\pi} = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\,,$$

que é o resultado desejado.

Responsável: Jaime Santos, DFUM e CFUM **E-Mail:** jaime.santos@fisica.uminho.pt