Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Exercícios

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

Antes de começarmos este exercício, vamos introduzir alguma notação nova.

Começamos pela convenção de soma de Einstein (a que ele chamava ironicamente uma grande descoberta matemática). Considerem-se dois vetores expressos na base cartesiana, $\boldsymbol{A} = \sum_i A_i \boldsymbol{e}_i$, $\boldsymbol{B} = \sum_i B_i \boldsymbol{e}_i$. O seu produto escalar é dado por $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = \sum_i A_i\, B_i$. Note-se que não apenas o índice i é somado de 1 a 3, correspondente a x, y e z, como aparece repetido na soma.

Assim, de acordo com esta convenção, a presença de um índice repetido implica que estamos a somar sobre ele (diz-se que é um índice mudo, porque pode ser substituido por outro que não esteja já presente na expressão sem alterar o significado da mesma). Podemos pois escrever, $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = A_i\, B_i = A_j\, B_j$.

Introduzimos agora o símbolo de permutação ε_{jlm} que é nulo se dois ou três dos índices forem iguais (p.e. $\varepsilon_{112} = 0$), e é de resto dado por $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{312} = \varepsilon_{231} = 1$, $\varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{132} = -1$, ou seja ele é 1 se jlm for uma permutação circular de 123 e -1 se a permutação envolver uma troca de quaisquer dois elementos relativamente a uma das três permutações circulares escritas acima. Note que é anti-simétrico na troca de dois dos índices, p.e. $\varepsilon_{jlm} = -\varepsilon_{mlj}$.

Qualquer componente do operador momento angular orbital pode ser escrita como

$$\hat{L}_j \;=\; \varepsilon_{jlm}\hat{x}_l\hat{p}_m\,, \tag{1}$$

onde se assume que se está a somar sobre os índices l e m dado que aparecem repetidos. Tome-se, por exemplo $j = 3$, ou seja a componente $\hat{L}_z$. Nesse caso, $\varepsilon_{3lm} = 1$, quando $l = 1$ e $m = 2$ e $\varepsilon_{3lm} = -1$ quando $l = 2$ e $m = 1$. Obtemos pois $\hat{L}_3 = \hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1 = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$, que é a expressão correta.

a) Sejam $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ e $\hat{D}$ operadores. Mostre que

$$[\hat{A}, \hat{C}\hat{D}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\,, \tag{2}$$

onde $[\hat{A}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}$ é o comutador entre os operadores $\hat{A}$ e $\hat{C}$.

Pista: Experimente adicionar e subtrair $\hat{C}\hat{A}\hat{D}$ à expressão para o comutador $[\hat{A}, \hat{C}\hat{D}]$.

b) Mostre que

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\,, \tag{3}$$

Pista: Experimente utilizar o resultado da alínea anterior e o facto de que o comutador é anti-simétrico.

c) Mostre que

$$[\hat{x}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k\,, \tag{4}$$

onde a convenção de soma de Einstein é assumida.

Pista: Substitua a expressão para $\hat{L}_j$, dada pela equação (1) em (4) e utilize (2). Utilize ainda a relação de comutação entre a coordenada e o momento $[\hat{x}_i, \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{im}$.

d) Mostre que

$$[\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\,, \tag{5}$$

onde a convenção de soma de Einstein é assumida.

Pista: Ver acima.

e) Seja $\hat{p}^2 = \hat{p}_i\hat{p}_i$, o operador quadrado do momento linear, que aparece na expressão para a energia cinética. Mostre que

$$[\hat{p}^2, \hat{L}_j] = 0\,, \tag{6}$$

Pista: Utilize o resultado (5).

f) Seja $\hat{r}^2 = \hat{x}_i\hat{x}_i$, o operador quadrado da coordenada, que aparece na expressão para a energia potencial de um oscilador harmónico em 3d. Mostre que

$$[\hat{r}^2, \hat{L}_j] = 0\,, \tag{7}$$

Pista: Ver acima.

g) Mostre que se n é um inteiro positivo, se tem

$$[\hat{r}^{2n}, \hat{L}_j] = 0\,, \quad n > 0 \tag{8}$$

Conclua que se o potencial $V(\hat{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\,\hat{r}^{2n}$ é uma função analítica de $\hat{r}^2$, o Hamiltoniano comuta com qualquer das componentes do momento angular. Note que não pode utilizar esta demonstração para o potencial de Coulomb (porquê?).

Pista: Aplique indução e utilize a equação (3) para demonstrar o resultado.

h*) Deve tentar resolver este exercício apenas se se sentir com muita vontade de manipular índices ;-)...

Introduzimos a seguinte fórmula, sem demonstração

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

onde, de acordo com a convenção, a soma se efetua sobre o índice m (para a demonstrar, basta considerar os diferentes valores possíveis para i, j, l, n).

Mostre que

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\,, \tag{10}$$

Pista: Substitua a expressão para $\hat{L}_j$ dada por (1) em (10) e utilize os resultados (4) e (5). Tenha cuidado com a manipulação dos índices.

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) Mostre, reproduzindo a demonstração apresentada na aula teórica para coordenadas cilíndricas, que o gradiente de uma função pode ser escrito em coordenadas esféricas, como

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

onde $(q_1, q_2.q_3) = (r, \theta, \varphi)$ e $h_\mu = \left\|\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial q_\mu}\right\|$.

b) Mostre igualmente, seguindo os mesmos passos dados na aula teórica para coordenadas cilíndricas, que em coordenadas esféricas, as operadores do momento angular se escrevem como

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

Note que $\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_\theta = \boldsymbol{e}_\varphi$, $\boldsymbol{e}_\theta\times\boldsymbol{e}_\varphi = \boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_\varphi\times\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}_\theta$, e que o produto vectorial é anticomutativo.

c) Mostre da última alínea que $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

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

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 $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$, como será igualmente demonstrado, 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 $m = l$, temos que $\hat{L}_+ Y_{ll}(\theta,\varphi) = 0$ (resp. $\hat{L}_- Y_{l-l}(\theta,\varphi) = 0$). Usando a expressão para $\hat{L}_+$ em coordenadas esféricas dada acima, mostre que

$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = c_l(\sin\theta)^l\, e^{il\varphi}\,, \tag{15}$$

onde c_l é uma constante de normalização.

Pista: Substitua simplesmente a fórmula dada na equação relevante e verifique que se trata de facto de uma solução da mesma.

e) Mostre, integrando o módulo quadrado de $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ sobre o ângulo sólido da esfera, que c_l é dada por

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\,, \tag{16}$$

Pista: Utilize substituição de variáveis no integral, uma tabela de integrais ou o Mathematica. Note que há uma fase que é uma mera convenção.