Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Soluções

Exercício 3: *Operadores de criação e destruição para o momento angular*

a) Podemos escrever $\hat{L}_x$ and $\hat{L}_y$ em termos de $\hat{L}_+$ e $\hat{L}_-$ como $\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$, $\hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$. Substituindo estas duas expressões na definição de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$, obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\ &= \frac{1}{4}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^2 - \frac{1}{4}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)^2 + \hat{L}_z^2 \\ &= \frac{1}{4}(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_-^2) - \frac{1}{4}(\hat{L}_+^2 - \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_-^2) + \hat{L}_z^2 \\ &= \frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+) + \hat{L}_z^2 \,. \end{aligned} \tag{16}$$

b) Uma vez que conhecemos a fórmula que desejamos provar, podemos utilizar indução, que funciona igualmente num espaço de dimensão finita. A fórmula é trivialmente verdadeira para $m = l$, logo o primeiro passo da indução está provado. Assumindo que é verdadeira para um dado m vejamos agora se é igualmente verdadeira para $m - 1$ (com $m > -l$). Obtemos, utilizando

$$\hat{L}_\pm \mid l\, m \,\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \mid l\, m \pm 1 \,\rangle \,, \tag{17}$$

o seguinte resultado

$$\begin{aligned} \mid l, m-1 \,\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \hat{L}_- \mid l, m \,\rangle \\ &= \frac{\hbar^{m-l}}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \hat{L}_-^{l-m+1} \mid l, l \,\rangle \\ &= \sqrt{\frac{(l+m)(l-m+1)}{l(l+1) - m(m-1)}} \hbar^{m-1-l} \sqrt{\frac{(l+m-1)!}{(2l)!(l-m+1)!}} \hat{L}_-^{l-(m-1)} \mid l, l \,\rangle \\ &= \hbar^{m-1-l} \sqrt{\frac{(l+m-1)!}{(2l)!(l-m+1)!}} \hat{L}_-^{l-(m-1)} \mid l, l \,\rangle \,, \end{aligned}$$

o que de facto mostra que a identidade também é válida para $m - 1$, dado que $(l+m)(l-m+1) = l(l+1) - m(m-1)$.

Mesmo se parece ser óbvio que este procedimento pode ser reproduzido se começarmos em $-m = -l$ e aplicarmos o operador de criação $\hat{L}_+$, apresentamos aqui a demonstração por completude. De novo, a fórmula é válida para $-m = -l$. Assumimo-la verdadeira para $-m$ e desejamos verificar se é válida para $-m+1$ (com $-m < l$). Temos

$$\begin{aligned}
\mid l, -m+1\,\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}}\hat{L}_+ \mid l, -m\,\rangle \\
&= \frac{\hbar^{m-l}}{\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}}\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}\hat{L}_+^{l-m+1} \mid l, -l\,\rangle \\
&= \sqrt{\frac{(l+m)(l-m+1)}{l(l+1)-m(m-1)}}\hbar^{m-1-l}\sqrt{\frac{(l+m-1)!}{(2l)!(l-m+1)!}}\hat{L}_+^{l-(m-1)} \mid l, -l\,\rangle \\
&= \hbar^{m-1-l}\sqrt{\frac{(l+m-1)!}{(2l)!(l-m+1)!}}\hat{L}_+^{l-(m-1)} \mid l, -l\,\rangle\,,
\end{aligned}$$

o que de novo mostra que a identidade é válida para $-m+1$, dado que $(l+m)(l-m+1) = l(l+1) - m(m-1)$, o que conclui a demonstração .

c) Como $\mid b\,\rangle$ é um autoestado de $\hat{B}$ e $[\hat{B}, \hat{A}] = -c\hat{A}$, onde c é um número real, podemos escrever $\hat{B}\hat{A} \mid b\,\rangle$ como

$$\begin{aligned}
\hat{B}\hat{A} \mid b\,\rangle &= [\hat{B}, \hat{A}] \mid b\,\rangle + \hat{A}\hat{B} \mid b\,\rangle \\
&= -c\hat{A} \mid b\,\rangle + b\hat{A} \mid b\,\rangle \\
&= (b-c)\hat{A} \mid b\,\rangle\,, \qquad (18)
\end{aligned}$$

o que mostra que $\hat{A} \mid b\,\rangle$ também é um autoestado de $\hat{B}$ com autovalor $b - c$ (o que explica *a posteriori* porque c é real, dado que o operador $\hat{B}$ é hermítico). Assim $\hat{A}$ diminui a grandeza dos autovalores de $\hat{B}$ em c e daí o nome de operador de destruição ou de descida.

d) Referimos igualmente que $[\hat{B}, \hat{A}]^\dagger = -[\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] = -[\hat{B}, \hat{A}^\dagger] = -c\hat{A}^\dagger$ ($\hat{B}$ é hermítico), donde resulta que $[\hat{B}, \hat{A}^\dagger] = c\hat{A}^\dagger$.

Repetindo o argumento acima, temos $\hat{B}\hat{A}^\dagger \mid b\,\rangle = (b+c) \mid b\,\rangle$, o que mostra que $\hat{A}^\dagger$ aumenta a grandeza dos autovalores de $\hat{B}$ em c e daí o nome operador de criação ou de subida.

e) Temos $\hat{B}^\dagger = (\hat{A}^\dagger\hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{B}$ e logo $\hat{B}$ é hermítico. Fazendo o rescaling $\hat{A} = \alpha\hat{a}$, $\hat{A}^\dagger = \overline{\alpha}\hat{a}^\dagger$ e $\hat{B} = |\alpha|^2\hat{n}$, com $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, substituindo no comutador de $[\hat{B}, \hat{A}] = -c\hat{A}$, e escolhendo $|\alpha|^2 = c$, em que assumimos c como sendo positivo, de outro modo o operador de destruição seria $\hat{A}^\dagger$ e não $\hat{A}$, obtemos $[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}$. Podemos agora escrever este comutador como

$$[\hat{n}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}\,, \qquad (19)$$

de onde concluímos que $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$ (já veremos que esta é a única solução possível da equação (19)).

Naturalmente que esta é a álgebra do oscilador harmónico em 1d, e este exercício serve como uma espécie de revisão de alguns dos conceitos associados a este problema.

f) Temos, para um estado arbitrário $\mid u\,\rangle$, $\langle\, u \mid \hat{n} \mid u\,\rangle = \|\, \hat{a} \mid u\,\rangle\|^2 \geq 0$, ou seja os valores próprios de $\hat{n}$ são positivos ou nulos. Seja $n_m \geq 0$, o mínimo desses autovalores e $|n_m\rangle$ o autoestado associado. Forçosamente, $\hat{a}\,|n_m\rangle = 0$, ou existiria um outro estado com autovalor $n_m - 1$, em contradição com a hipótese. Mas nesse caso, $\hat{n}\,|n_m\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n_m\rangle = 0$, logo $n_m = 0$.

Considere-se agora a fórmula, $|\, n\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n \mid 0\,\rangle$. É trivialmente verdadeira para $n = 0$. Suponha-se agora que é verdadeira para n. Nesse caso, temos $|\, n+1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^\dagger \mid n\,\rangle$. Aplicando o operador $\hat{n}$ a esta equação, obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{n} \mid n+1\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{n}\hat{a}^\dagger \mid n\,\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^\dagger\hat{n} \mid n\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,[\hat{n},\hat{a}^\dagger] \mid n\,\rangle = (n+1) \mid n+1\,\rangle\,, \qquad (20)
\end{aligned}$$

o que mostra que $|n+1\rangle$ é um vetor próprio de $\hat{n}$ com valor próprio $n+1$. Do mesmo modo, podemos mostrar que está normalizado

$$\langle n+1 \mid n+1\,\rangle = \frac{1}{n+1}\langle\, n \mid \hat{a}\hat{a}^\dagger \mid n\,\rangle = \frac{1}{n+1}\langle\, n \mid (\hat{n} + \hat{\mathbb{1}}) \mid n\,\rangle = 1\,, \qquad (21)$$

onde utilizamos a identidade $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{n} + \hat{\mathbb{1}}$, que não é mais do que outra forma de escrever $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$.

Finalmente, considere-se a equação

$$([\hat{a},\hat{a}^\dagger] - \hat{\mathbb{1}})\hat{a} = \hat{0}\,. \qquad (22)$$

Defina-se $\hat{G} = [\hat{a},\hat{a}^\dagger] - \hat{\mathbb{1}}$, que é um operador hermítico. Da equação (22), resulta $\hat{a}^\dagger\hat{G}\hat{a} = 0$. Para qualquer estado arbitrário, $|\, u\,\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} u_n \mid n\,\rangle$, que se pode escrever à custa dos autoestados de $\hat{n}$ (que por hipótese formam uma base completa), definimos $|\, v\,\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_{n-1}}{\sqrt{n}} \mid n\,\rangle$, de norma finita, < 1. Como $\hat{a} \mid v\,\rangle = \mid u\,\rangle$, dado que $\hat{a} \mid n\,\rangle = \sqrt{n} \mid n-1\,\rangle$ (porquê?), obtemos

$$\langle\, v \mid \hat{a}^\dagger\hat{G}\hat{a} \mid v\,\rangle = \langle\, u \mid \hat{G} \mid u\,\rangle = 0\,, \qquad (23)$$

o que implica $\hat{G} = 0$, cqd.

Exercício 4: *Operador quadrado do módulo do momento angular orbital em coordenadas esféricas*

a) Substituindo as fórmulas (13) e (14) na fórmula (16), obtemos para os sucessivos termos de (16)

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+\hat{L}_- &= -\hbar^2 e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (24)\\
&= -\hbar^2\cot\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{i}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\,,\\
\hat{L}_-\hat{L}_+ &= -\hbar^2 e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (25)\\
&= -\hbar^2\cot\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \frac{i}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\,,\\
\hat{L}_z^2 &= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \qquad (26)
\end{aligned}$$

Somando estes três termos com os coeficientes apropriados, obtemos

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] . \tag{27}$$

b) Afirmamos que $Y_{ll}(\theta,\varphi) = c_l (\sin\theta)^l \, e^{il\varphi}$ é função própria de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ com valor próprio $\hbar^2 l(l+1)$ e de $\hat{L}_z$ com valor próprio $\hbar l$, e em que c_l é uma constante de normalização , cujo valor determinamos. Aplicando a expressão (27) a esta função, obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_{ll}(\theta,\varphi) &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y_{ll}(\theta,\varphi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y_{ll}(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2} \right] \\ &= \hbar^2 c_l e^{il\varphi} \left[-\frac{l}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\cos\theta \sin^l\theta \right) + l^2 \sin^{l-2}\theta \right] \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_{ll}(\theta,\varphi) . \end{aligned} \tag{28}$$

Aplicando a expressão (13) para $\hat{L}_z$ a esta função, obtemos

$$\hat{L}_z Y_{ll}(\theta,\varphi) = -i\hbar \frac{\partial Y_{ll}(\theta,\varphi)}{\partial\varphi} = \hbar l Y_{ll}(\theta,\varphi) , \tag{29}$$

completando o exercício.

c) Como $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ é um operador real, como segue de (27), $\overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ é função própria deste operador com o mesmo valor próprio que $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, ou seja $\hat{\boldsymbol{L}}^2 \overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$.

Considere agora o complexo conjugado da equação de valores próprios $\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Temos

$$\overline{-i\hbar \frac{\partial Y_{lm}(\theta,\varphi)}{\partial\varphi}} = i\hbar \frac{\partial \overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi)}{\partial\varphi} = \hbar m \overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi) , \tag{30}$$

que pode ser escrita como $\hat{L}_z \overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = -\hbar m \overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$, ou seja $\overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ é função própria de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ com valor próprio $\hbar^2 l(l+1)$ e de $\hat{L}_z$ com valor próprio $-\hbar m$. Como está obviamente normalizada, concluímos que $\overline{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{l-m}(\theta,\varphi)$.

d) Temos, do exercício 2, para $l = 2$, que $Y_{22}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin\theta)^2 \, e^{2i\varphi}$. Por aplicação sucessiva de $\hat{L}_-$ a esta expressão, obtemos da fórmula (17), $Y_{21}(\theta,\varphi) = \frac{\hat{L}_-}{2\hbar} Y_{22}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta\cos\theta e^{i\varphi}$ e finalmente $Y_{20}(\theta,\varphi) = \frac{\hat{L}_-}{\sqrt{6}\hbar} Y_{21}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos\theta^2 - 1)$. Para obter os restantes harmónicos esféricos com $l = 2$, utilizamos simplesmente o resultado da alínea anterior.

e) É um cálculo trivial

$$\int d\Omega \mid Y_{20}(\theta,\varphi) \mid^2 = \frac{5}{16\pi} \cdot 4\pi \int_0^1 du \, (3u^2 - 1)^2 = 1 , \tag{31}$$

onde fizemos a substituição $u = \sin\theta$ no integral sobre a coordenada θ.

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