

Mecânica Quântica: Momento Angular Orbital

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 19-23 de novembro de 2019

Conteúdo

1	Introdução	1
2	O momento angular orbital	2
3	Autofunções e autovalores do momento angular orbital	4
4	Operadores compatíveis e incompatíveis	8
5	O princípio de incerteza generalizado	12
6	O operador de levantamento e de abaixamento	16
7	A representação matricial do momento angular orbital	20

1 Introdução

Há duas maneiras de se discutir o momento angular orbital na mecânica quântica (Thompson, 1994). Uma, usa a definição do momento angular clássico, a saber, o produto vetorial da posição da partícula pelo seu momento linear, logo, em seguida, faz-se a conversão dos elementos clássicos pelos operadores quânticos (posição e momento linear) — disso resulta no operador do momento angular

orbital. A outra, utiliza as propriedades geométricas das rotações e, assim, deduz-se diretamente o operador do momento angular orbital, sem a necessidade de se lançar mão da definição clássica.

O objetivo deste artigo é deduzir o operador do momento angular orbital partindo da definição clássica do momento angular. Ademais, apresentar suas autofunções, seus autovalores e sua representação matricial.

2 O momento angular orbital

O momento angular orbital é representado por \mathbf{L} . Ele é definido pelo produto vetorial $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ (Herbert Goldstein, 2001). Conforme se vê na Figura 1, o momento angular orbital se relaciona com o ângulo α entre a posição \mathbf{r} e o momento linear \mathbf{p} . Seu módulo é: $|\mathbf{L}| = rp \sin \alpha$, e sua direção é perpendicular ao plano que contém os vetores \mathbf{r} e \mathbf{p} . Já seu sentido é determinado pela regra da mão direita, fazendo \mathbf{r} correr em direção à \mathbf{p} .

A natureza radial e angular do momento angular orbital favorece um sistema de coordenadas não-cartesiano, como o sistema esférico, de coordenadas radial r , polar θ e azimutal ϕ , sendo as faixas de valores: $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

A Figura 1 mostra que o momento angular orbital clássico é o vetor $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$. Na mecânica quântica, o momento angular orbital continua sendo um vetor, no sentido de possuir 3 componentes, todavia, o tratamento quântico utiliza operadores nos lugares dos elementos clássicos (Liboff, 2002). O vetor, então, é um vetor de operadores representado por $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$.

No sistema cartesiano, as componentes do momento angular orbital clássico podem ser determinadas pelo determinante:

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}. \quad (1)$$

O que resulta em:

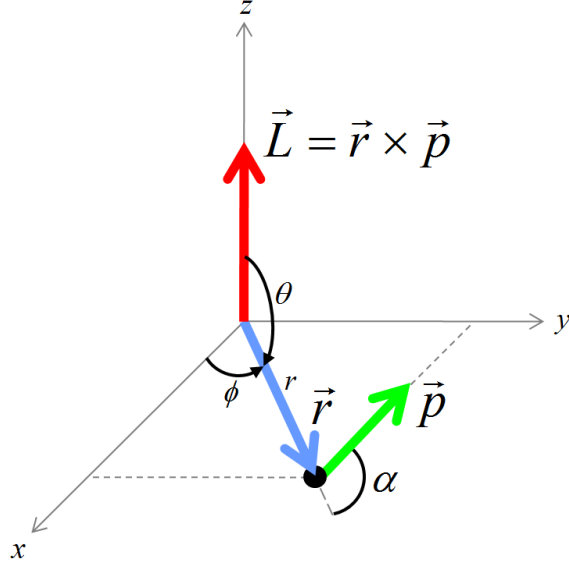


Figura 1: O momento angular orbital clássico.

$$\begin{aligned}
 L_x &= yp_z - zp_y; \\
 L_y &= zp_x - xp_z; \\
 L_z &= xp_y - yp_x.
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Na mecânica quântica, o operador do momento angular orbital deriva diretamente da estrutura do \mathbf{L} , fazendo a conversão dos elementos clássicos em operadores:

$$\begin{aligned}
 x &\rightarrow \hat{x} = x; \\
 y &\rightarrow \hat{y} = y; \\
 z &\rightarrow \hat{z} = z; \\
 p_x &\rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \\
 p_y &\rightarrow \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \\
 p_z &\rightarrow \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Substituindo (2) em (3), as componentes do operador $\hat{\mathbf{L}}$ se escrevem:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \\
\hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \\
\hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).
\end{aligned} \tag{4}$$

Em (4) temos as componentes cartesianas do $\hat{\mathbf{L}}$ escritas em função das coordenadas cartesianas. Agora, em função das coordenadas esféricas, as componentes cartesianas do $\hat{\mathbf{L}}$ se escrevem:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cotg\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right); \\
\hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cotg\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right); \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}.
\end{aligned} \tag{5}$$

Como vimos, o operador do $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ é o operador $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$, de componentes cartesianas (4) ou (5): Escrito na forma (5), não se atua na coordenada radial r , somente nas coordenadas angulares θ e ϕ .

O operador do momento angular orbital, ao quadrado, se escreve:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{6}$$

Em função das coordenadas esféricas, a equação (6) tem a forma:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cotg\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right). \tag{7}$$

3 Autofunções e autovalores do momento angular orbital

A caracterização do momento angular clássico pode ser feita apontando os valores de suas 3 componentes, L_x , L_y e L_z (simultaneamente), o que leva a conhecer o

valor do módulo ou magnitude L .

O tratamento quântico *não* caracteriza o momento angular por discriminar os valores das 3 componentes. Conforme esclarece (Liboff, 2002), *simultaneamente*, determina-se os valores do módulo e de apenas 1 componente do momento angular — geralmente, prefere-se especificar a componente z .

Vamos explicitar os valores de L^2 e L_z através das equações de autovalor dos operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z . As formas (5) e (7) não dependem da coordenada radial, por isso, as equações de autovalor geram autofunções que dependem somente das coordenadas angulares:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m} &= L^2 Y_{l,m}; \\ \hat{L}_z Y_{l,m} &= L_z Y_{l,m}.\end{aligned}\tag{8}$$

Os autovalores L^2 e L_z possuem os seguintes valores:

$$\begin{aligned}L^2 &= l(l+1)\hbar^2; \\ L_z &= m\hbar.\end{aligned}\tag{9}$$

Apesar de $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z compartilharem as autofunções, os autovalores são bem diferentes: ver as equações (8) e (9).

As autofunções $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ são conhecidas como harmônicos esféricos. O número l é o número quântico orbital e o número m é o número quântico azimutal, ou número quântico magnético. Os valores do número quântico orbital são: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Para cada l , os valores do número quântico azimutal são: $m = l, (l-1), (l-2), \dots, -l$. A Figura 2 torna explícito os harmônicos esféricos para $l = 0, 1, 2, 3$.

Dada uma partícula com momento angular orbital de magnitude $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ e componente z , $L_z = m\hbar$, a densidade de probabilidade da posição (θ, ϕ) é determinada pela relação:

$$|Y_{l,m}|^2 = Y_{l,m}^*(\theta, \phi) Y_{l,m}(\theta, \phi),\tag{10}$$

e a probabilidade de essa partícula estar entre (θ_1, θ_2) e (ϕ_1, ϕ_2) é determinada pela integral:

Quadro Harmônico Esférico	
$Y_{0,0} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	
$Y_{1,1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{i\phi}$	
$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$	$Y_{3,3} = -\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta e^{3i\phi}$
$Y_{1,-1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{-i\phi}$	$Y_{3,2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta e^{2i\phi}$
$Y_{2,2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{2i\phi}$	$Y_{3,1} = -\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{i\phi}$
$Y_{2,1} = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi}$	$Y_{3,0} = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$	$Y_{3,-1} = \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{-i\phi}$
$Y_{2,-1} = \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{-i\phi}$	$Y_{3,-2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta e^{-2i\phi}$
$Y_{2,-2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{-2i\phi}$	$Y_{3,-3} = \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta e^{-3i\phi}$

Figura 2: Alguns harmônicos esféricos.

$$P_{l,m} = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\phi_1}^{\phi_2} |Y_{l,m}|^2 d\Omega. \quad (11)$$

Os harmônicos esféricos são funções normalizadas e ortogonais, pois:

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1, \quad \text{se } \bar{l} = l \text{ e } \bar{m} = m; \quad (12)$$

= 0, caso contrário.

Nota: $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

Observando a Figura 2, conclui-se que a densidade de probabilidade não depende do ângulo ϕ . Por causa disso, pode-se fazer a representação gráfica da densidade de probabilidade anexando o valor de $|Y_{l,m}|^2$ a um raio $R(\theta)$. Daí, fazendo a varredura angular de θ , o raio $R(\theta)$ “desenha” pelo espaço, a densidade de probabilidade na forma de uma curva esfericamente simétrica. As Figuras 3, 4 e 5 apresentam as curvas das densidades de probabilidade geradas por esse método.

Densidade de Probabilidade com os Harmônicos Esféricos $l = 0$ e $l = 1$

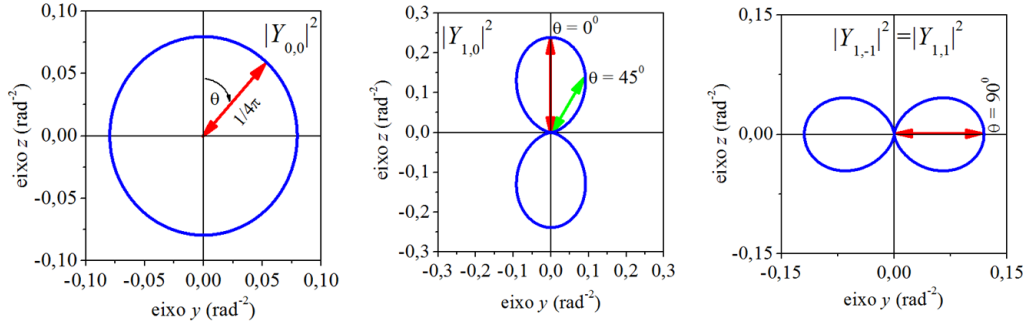


Figura 3: Densidade de probabilidade para $l = 0$ e $l = 1$.

Densidade de Probabilidade com os Harmônicos Esféricos $l = 2$

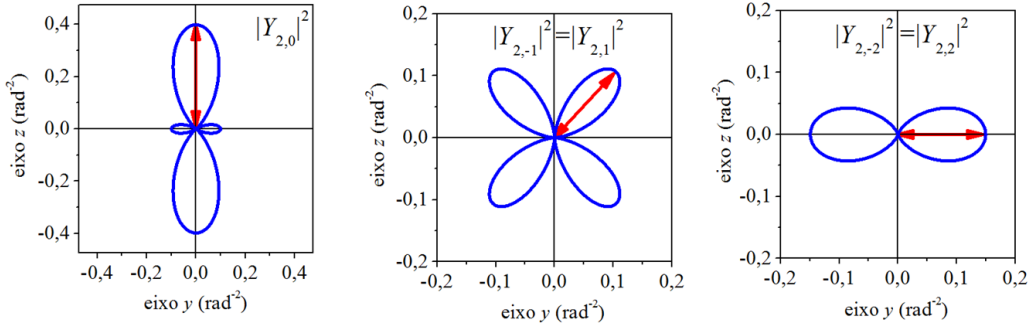


Figura 4: Densidade de probabilidade para $l = 2$.

Densidade de Probabilidade com os Harmônicos Esféricos $l = 3$

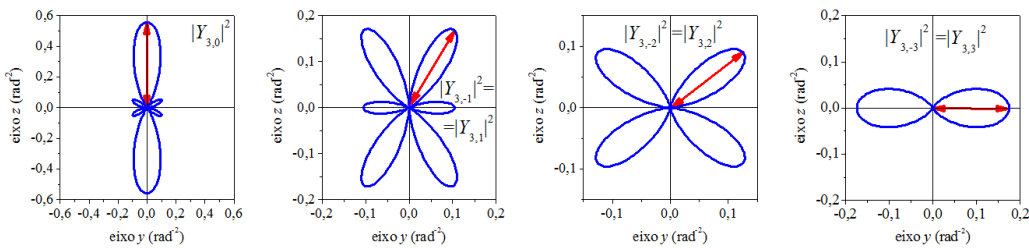


Figura 5: Densidade de probabilidade para $l = 3$.

Como foram construídos, os contornos das curvas indicam a magnitude da densidade de probabilidade na direção do ângulo polar θ , sendo que esse ângulo parte do eixo z . Para auxiliar a visualização, setas, indicando a magnitude da densidade, foram desenhadas em certas direções angulares. Visto que a densidade de probabilidade não depende do ângulo azimutal ϕ , as figuras devem ser rodadas sobre o eixo z para se visualizar as figuras das densidades tridimensionais. Como se vê, exceto para $l = 0$, que gera uma densidade constante, as demais densidades de probabilidade apresentam preferências angulares. Por exemplo, observando a Figura 3, a maior probabilidade de encontrar a partícula no estado $Y_{1,0}$ é em $\theta = 0^0$, todavia, se a partícula estiver no estado $Y_{1,1}$, a maior probabilidade de encontrá-la será em $\theta = 90^0$, pois, em $\theta = 0^0$, a probabilidade é zero.

4 Operadores compatíveis e incompatíveis

Neste capítulo, vamos analisar situações em que se manifesta momento angular orbital, nosso objetivo, é entender quando dois operadores são compatíveis e quando são incompatíveis.

Considere uma partícula orbitando livre em torno de um ponto central, como se estivesse sobre a superfície de uma esfera, executando “voltas e mais voltas”. À rotação associa-se um momento angular orbital. Nós, então, montamos uma experiência para medir a magnitude do momento angular. Vamos supor que encontramos $L = \sqrt{12}\hbar$, correspondente ao número quântico orbital $l = 3$. Logo em seguida, montamos outra experiência para medir a componente z do momento angular orbital de magnitude $\sqrt{12}\hbar$. Quais seriam os possíveis resultados da nova experiência? A previsão quântica diz que poderíamos encontrar qualquer um dos seguintes valores:

$$\begin{aligned}
L_z &= 3\hbar, \\
\text{ou} &= 2\hbar, \\
\text{ou} &= 1\hbar, \\
\text{ou} &= 0\hbar, \\
\text{ou} &= -1\hbar, \\
\text{ou} &= -2\hbar, \\
\text{ou} &= -3\hbar.
\end{aligned} \tag{13}$$

Os possíveis resultados (13) podem ser geometricamente representados por vetores de comprimento proporcional à $\sqrt{12}\hbar$, orientados de tal maneira que suas projeções no eixo z sejam proporcionais aos valores de L_z , conforme aparece na Figura 6.

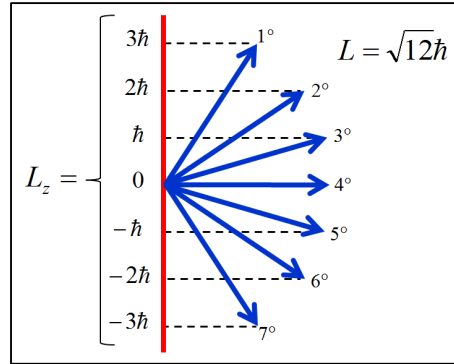


Figura 6: Ilustração de momentos angulares orbitais.

Após a primeira medição, discernimos qual a magnitude do momento angular, mas ainda não sabemos sua direção, pois há 7 possibilidades — ver novamente a Figura 6. Diz-se que $L = \sqrt{12}\hbar$ é 7 vezes degenerado, e conclui-se que está associado a uma superposição de 7 autoestados: $Y_{3,3}, Y_{3,2}, Y_{3,1}, Y_{3,0}, Y_{3,-1}, Y_{3,-2}, Y_{3,-3}$.

Vamos, então, supor que uma segunda medição resulte em $L_z = 2\hbar$, equivalente ao número quântico azimutal $m = 2$. Agora podemos discernir qual é a direção do momento angular orbital, pois somos induzidos a perceber de que se trata do segundo momento da Figura 6.

Concluimos, após os dois experimentos mentais, que a partícula estaria no estado $Y_{3,2}$, autoestado comum de $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z . Concluimos, também, que a 1ª experiência,

relacionada com $\hat{\mathbf{L}}^2$, somente revela o valor do módulo do momento angular orbital, e que a 2ª experiência, relacionada com \hat{L}_z , completa a caracterização desse momento, ajudando a distinguir qual é a sua orientação.

♦ E se mudássemos a ordem das experiências?

A Figura 7 ilustra a nova sequência: 1ª experiência relacionada com \hat{L}_z , 2ª experiência relacionada com $\hat{\mathbf{L}}^2$.

Ao fazer a medição da componente z do momento angular orbital, iríamos encontrar $L_z = 2\hbar$. Daí, perguntaríamos: Qual é o valor do módulo? A resposta estaria condicionada aos valores que satisfizessem a expressão $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$:

$$\begin{aligned} L &= 0, \\ \text{ou } &= \sqrt{2}\hbar, \\ \text{ou } &= \sqrt{6}\hbar, \\ \text{ou } &= \sqrt{12}\hbar, \\ \text{ou } &= \sqrt{20}\hbar, \\ &\vdots \end{aligned} \tag{14}$$

Em seguida, faríamos a medição do módulo, por exemplo, com resultado $L = \sqrt{12}\hbar$. Por fim, saberíamos que a partícula se encontra no estado $Y_{3,2}$, representado pelo terceiro vetor da Figura 7.

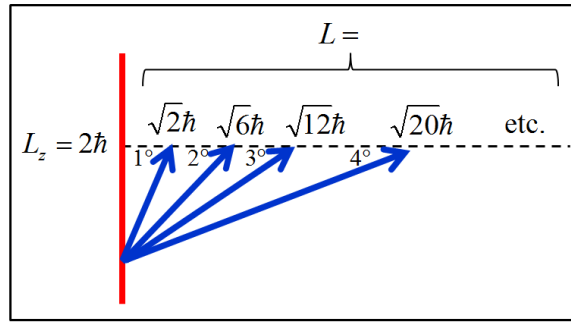


Figura 7: Ilustração de momentos angulares orbitais.

As experiências que acabamos de considerar, nos ajudam a entender que os operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z possibilitam a montagem de experiências compatíveis (que podem

coexistir), sendo o registro da experiência $\hat{\mathbf{L}}^2$ complementar ao registro da experiência \hat{L}_z , e vice-versa. Dizemos, então, que os operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z são **operadores compatíveis**.

Todavia, há situações em que as experiências são incompatíveis. Por exemplo, se montássemos experiências realcionadas com \hat{L}_z e \hat{L}_x , chegaríamos à conclusão que a experiência \hat{L}_x não completaria a informação da experiência \hat{L}_z . Isso porque o autoestado de \hat{L}_x não é solução da equação de autoestado de \hat{L}_z . Nesse caso, dizemos que os operadores \hat{L}_z e \hat{L}_x são **operadores incompatíveis**.

Experiências compatíveis só ocorrem quando os operadores compartilham o mesmo conjunto de autoestados, como o par $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z , que usa o conjunto $Y_{l,m}$ em comum. E, para saber se dois operadores, por exemplo, \hat{A} e \hat{B} , são operadores compatíveis e têm autofunções em comum, usa-se uma ferramenta matemática chamada comutador:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (15)$$

Daí, diz-se que \hat{A} e \hat{B} são operadores compatíveis e possuem autofunções em comum, se \hat{A} e \hat{B} comutam entre si, ou seja, se:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \implies [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (16)$$

O teste do comutador mostra que as componentes do operador do momento angular não comutam entre si:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z; \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x; \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y. \end{aligned} \quad (17)$$

Por outro lado, $\hat{\mathbf{L}}^2$ comuta com todas componentes do $\hat{\mathbf{L}}$:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] &= 0; \\
[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] &= 0; \\
[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] &= 0.
\end{aligned} \tag{18}$$

Usando o critério (16) , pode-se afirmar que os operadores (17) são incompatíveis (não compartilham suas autofunções), já os operadores (18) são compatíveis e, por isso, compartilham suas autofunções: Segundo (8) , compartilham as autofunções harmônicos esféricos — ver a Figura 2.

Uma visão estendida de operações e propriedades de comutadores pode ser vista na Figura 8.

Quadro Comutador	Momento	M. Angular
Propriedades	$[\hat{p}_x, \hat{p}_x] = 0$	$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$
	$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$	$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$
	$[\hat{p}_x, \hat{p}_z] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$
	$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$	$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$
	$[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$	$[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0$
	$[\hat{x}, \hat{p}_z] = 0$	$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$
	$[\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{x}] = i\hbar \hat{y}$
	$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$	$[\hat{L}_z, \hat{y}] = -i\hbar \hat{x}$
	$[\hat{y}, \hat{p}_z] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{z}] = 0$
	$[\hat{z}, \hat{p}_x] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{p}_y$
Posição	$[\hat{x}, \hat{x}] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{p}_y] = -i\hbar \hat{p}_x$
	$[\hat{x}, \hat{y}] = 0$	$[\hat{L}_z, \hat{p}_z] = 0$
	$[\hat{x}, \hat{z}] = 0$	

Figura 8: Operações e propriedades de comutadores.

5 O princípio de incerteza generalizado

O princípio de incerteza é de autoria de W. Heisenberg (Heisenberg, 1927). Uma formulação geral e aplicada em particular ao caso do momento angular foi publi-

cada por H.P. Robertson (Robertson, 1929). A formulação generalizada se aplica a qualquer par de operadores \hat{A} e \hat{B} , que possuem autovalores A e B :

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \imath [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|. \quad (19)$$

A sequência matemática em (19) é: (1º) fazer o comutador $[\dots]$, (2º) fazer o valor esperado $\langle \dots \rangle$, e (3º) fazer o módulo $|\dots|$.

Vamos, então, desenvolver o princípio de incerteza generalizado utilizando os operadores \hat{L}_x e \hat{L}_y , de autovalores L_x e L_y , respectivamente:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \left| \langle \imath [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \rangle \right|. \quad (20)$$

Segundo (17), o (1º) passo resulta em:

$$\imath [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hbar \hat{L}_z. \quad (21)$$

O (2º) passo resulta em:

$$\langle \imath [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \rangle = -\hbar \langle \hat{L}_z \rangle. \quad (22)$$

E o (3º) passo resulta em:

$$\left| \langle \imath [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \rangle \right| = \hbar \left| \langle \hat{L}_z \rangle \right|. \quad (23)$$

Levando o resultado (23) ao princípio (19), tem-se:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \hbar \left| \langle \hat{L}_z \rangle \right|. \quad (24)$$

A relação (24) exige que se determine o valor esperado do operador \hat{L}_z . Para isso, vamos supor uma partícula no autoestado $Y_{3,2}$, de número azimutal $m = 2$. Por meio de (8): $\hat{L}_z Y_{3,2} = 2\hbar Y_{3,2}$. Ademais, usando o fato dos harmônicos esféricos serem funções normalizadas e ortogonais (12):

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}_z \rangle &= \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} Y_{3,2}^* \hat{L}_z Y_{3,2} d\Omega \\
&= 2\hbar \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{3,2}^* Y_{3,2} d\Omega \\
&= 2\hbar.
\end{aligned} \tag{25}$$

Portanto, substituindo (25) em (24):

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \hbar^2. \tag{26}$$

No geral, supondo a partícula no autoestado $Y_{l,m}$, tem-se:

$$\langle \hat{L}_z \rangle = m\hbar; \tag{27}$$

o que implica em:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2} m\hbar^2. \tag{28}$$

Como se deve interpretar o resultado (28)? A partícula é preparada em $Y_{l,m}$: autoestado de \hat{L}_z , mas não de \hat{L}_x , nem de \hat{L}_y . Por isso, em uma medição de L_x , qualquer autovalor de \hat{L}_x poderá fazer parte do registro. Em uma série de medições, o espectro dos resultados fica disperso, com desvio padrão ΔL_x . Analogamente, em medições de L_y , o espectro dos resultados também é disperso, com desvio padrão ΔL_y . O resultado (28) garante que o produto das dispersões parte de $\frac{1}{2} m\hbar^2$, não podendo ser menor.

A respeito dos autovalores dos operadores \hat{L}_x e \hat{L}_y , entende-se que todas direções no espaço são fisicamente equivalentes, não há motivo para a quantização do eixo x ou y ser diferente da quantização do eixo z . Se o autovalor de \hat{L}_z é o valor $L_z = m\hbar$, os autovalores de \hat{L}_x e \hat{L}_y serão os valores $L_x = m_x\hbar$ e $L_y = m_y\hbar$, sendo m_x e m_y inteiros dependentes do número quântico orbital: $m_x = l, (l-1), \dots, -l$; e $m_y = l, (l-1), \dots, -l$.

Em nossa mente, estamos trabalhando com uma partícula preparada no estado $Y_{3,2}$, caracterizada com $L = \sqrt{12}\hbar$ e, especificamente, possuindo componente z igual a $L_z = 2\hbar$. Uma experiência, montada para efetuar a medição da componente x dessa partícula, tem como possíveis resultados os autovalores de \hat{L}_x :

$$\begin{aligned}
L_x &= 3\hbar, \\
\text{ou} &= 2\hbar, \\
\text{ou} &= 1\hbar, \\
\text{ou} &= 0\hbar, \\
\text{ou} &= -1\hbar, \\
\text{ou} &= -2\hbar, \\
\text{ou} &= -3\hbar.
\end{aligned} \tag{29}$$

Em uma série de medições, de partículas no estado $Y_{3,2}$, o resultado médio será:

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \frac{3\hbar + 2\hbar + 1\hbar + 0 - 1\hbar - 2\hbar - 3\hbar}{7} = 0. \tag{30}$$

Analogamente, se a experiência fosse montada para efetuar a medição da componente y :

$$\langle \hat{L}_y \rangle = \frac{3\hbar + 2\hbar + 1\hbar + 0 - 1\hbar - 2\hbar - 3\hbar}{7} = 0. \tag{31}$$

As médias (30) e (31) resultam em zero, mas, individualmente, as leituras das medições vão se distribuir em curvas estatísticas, tipo gaussiana, com grau de dispersão ΔL_x e ΔL_y e produto (28).

A respeito dos autoestados dos operadores \hat{L}_x e \hat{L}_y , pode-se representá-los por $|l, m_x\rangle_x$ e $|l, m_y\rangle_y$, respectivamente. Então, antes de se iniciar a medição de L_x , o estado $Y_{3,2}$ está em uma superposição linear de $|l, m_x\rangle_x$, do tipo:

$$Y_{3,2} = C_3^x|3, 3\rangle_x + C_2^x|3, 2\rangle_x + C_1^x|3, 1\rangle_x + C_0^x|3, 0\rangle_x + C_{-1}^x|3, -1\rangle_x + C_{-2}^x|3, -2\rangle_x + C_{-3}^x|3, -3\rangle_x. \tag{32}$$

Em (32), $|C_{m_x}^x|^2$ é a probabilidade do estado $|3, m_x\rangle_x$ ser o estado final da experiência. Usando os coeficientes da superposição, o valor esperado se escreve:

$$\langle \hat{L}_x \rangle = |C_3^x|^2(3\hbar) + |C_2^x|^2(2\hbar) + |C_1^x|^2(1\hbar) + |C_0^x|^2(0) + |C_{-1}^x|^2(-1\hbar) + |C_{-2}^x|^2(-2\hbar) + |C_{-3}^x|^2(-3\hbar) = 0. \quad (33)$$

Nota: A equação (30) é um caso especial da equação (33), quando se considera igualdade de probabilidades, ou seja, $|C_{m_x}^x|^2 = \frac{1}{7}$.

Analogamente, se a experiência fosse montada para efetuar a medição da componente y do momento angular orbital, de partículas preparadas no estado $Y_{3,2}$, teríamos:

$$Y_{3,2} = C_3^y|3, 3\rangle_y + C_2^y|3, 2\rangle_y + C_1^y|3, 1\rangle_y + C_0^y|3, 0\rangle_y + C_{-1}^y|3, -1\rangle_y + C_{-2}^y|3, -2\rangle_y + C_{-3}^y|3, -3\rangle_y. \quad (34)$$

E o valor esperado seria:

$$\langle \hat{L}_y \rangle = |C_3^y|^2(3\hbar) + |C_2^y|^2(2\hbar) + |C_1^y|^2(1\hbar) + |C_0^y|^2(0) + |C_{-1}^y|^2(-1\hbar) + |C_{-2}^y|^2(-2\hbar) + |C_{-3}^y|^2(-3\hbar) = 0. \quad (35)$$

6 O operador de levantamento e de abaixamento

Agora vamos desenvolver ferramentas matemáticas que nos ajudarão a resolver o que está faltando em (36):

$$\begin{aligned} \hat{L}_x Y_{l,m} &= ? \\ \hat{L}_y Y_{l,m} &= ? \\ \hat{L}_z Y_{l,m} &= m\hbar Y_{l,m}. \end{aligned} \quad (36)$$

Respectivamente, o operador de levantamento e o operador de abaixamento são definidos como:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ Y_{l,m} &= C_+ Y_{l,m+1}; \\ \hat{L}_- Y_{l,m} &= C_- Y_{l,m-1};\end{aligned}\tag{37}$$

onde:

$$\begin{aligned}C_+ &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}; \\ C_- &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}.\end{aligned}\tag{38}$$

Os nomes são apropriados, pois o operador \hat{L}_+ levanta o estado $Y_{l,m}$ para o estado $Y_{l,m+1}$, enquanto que o operador \hat{L}_- abaixa o estado $Y_{l,m}$ para o estado $Y_{l,m-1}$. Por exemplo:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ Y_{1,1} &= 0; \\ \hat{L}_+ Y_{1,0} &= \hbar\sqrt{2} Y_{1,1}; \\ \hat{L}_+ Y_{1,-1} &= \hbar\sqrt{2} Y_{1,0}.\end{aligned}\tag{39}$$

Outro exemplo:

$$\begin{aligned}\hat{L}_- Y_{1,1} &= \hbar\sqrt{2} Y_{1,0}; \\ \hat{L}_- Y_{1,0} &= \hbar\sqrt{2} Y_{1,-1}; \\ \hat{L}_- Y_{1,-1} &= 0.\end{aligned}\tag{40}$$

Os operadores \hat{L}_+ e \hat{L}_- definem os operadores \hat{L}_x e \hat{L}_y , da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-); \\ \hat{L}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-).\end{aligned}\tag{41}$$

Podemos, então, completar (36):

$$\begin{aligned}\hat{L}_x Y_{l,m} &= \frac{1}{2} (C_+ Y_{l,m+1} + C_- Y_{l,m-1}); \\ \hat{L}_y Y_{l,m} &= \frac{1}{2i} (C_+ Y_{l,m+1} - C_- Y_{l,m-1}); \\ \hat{L}_z Y_{l,m} &= m\hbar Y_{l,m}.\end{aligned}\tag{42}$$

Buscando a expressão do desvio padrão da componente x do momento angular orbital, tem-se que determinar:

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle \hat{L}_x^2 \rangle - \langle \hat{L}_x \rangle^2}. \quad (43)$$

Primeiro passo, determinar o valor esperado da componente x do operador do momento angular orbital, usando o fato dos harmônicos esféricos serem funções ortogonais (12):

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_x \rangle &= \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \hat{L}_x Y_{l,m} \, d\Omega \\ &= \frac{1}{2} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \hat{L}_+ Y_{l,m} \, d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \hat{L}_- Y_{l,m} \, d\Omega \\ &= \frac{1}{2} C_+ \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m+1} \, d\Omega + \frac{1}{2} C_- \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m-1} \, d\Omega \\ &= 0. \end{aligned} \quad (44)$$

Nota: O resultado geral (44) confirma o resultado específico (30).

Segundo passo, determinar o quadrado das componentes x e y do operador do momento angular orbital:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^2 &= \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \\ &= \frac{1}{4} (\hat{L}_+^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_-^2). \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y^2 &= \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \\ &= \frac{1}{4} (-\hat{L}_+^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ - \hat{L}_-^2). \end{aligned} \quad (46)$$

Ao somar (45) e (46), lembrando que $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$, escreve-se:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+). \quad (47)$$

Terceiro passo, usando (45), determinar o valor esperado do quadrado da componentes x do operador do momento angular orbital:

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \frac{1}{4} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_-^2 \right) Y_{l,m} d\Omega. \quad (48)$$

(1^o) termo de (48):

$$\int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{L}_+^2 \right) Y_{l,m} d\Omega \propto \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m+2} d\Omega = 0. \quad (49)$$

(4^o) termo de (48):

$$\int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{L}_-^2 \right) Y_{l,m} d\Omega \propto \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m-2} d\Omega = 0. \quad (50)$$

Substituindo (47), (49) e (50) em (48):

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \right) Y_{l,m} d\Omega. \quad (51)$$

(1^o) termo de (51):

$$\frac{1}{2} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{\mathbf{L}}^2 \right) Y_{l,m} d\Omega = \frac{1}{2} l(l+1) \hbar^2 \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m} d\Omega = \frac{1}{2} l(l+1) \hbar^2. \quad (52)$$

(2^o) termo de (51):

$$\frac{1}{2} \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* \left(\hat{L}_z^2 \right) Y_{l,m} d\Omega = \frac{1}{2} m^2 \hbar^2 \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m} d\Omega = \frac{1}{2} m^2 \hbar^2. \quad (53)$$

Levando (52) e (53) à expressão (51):

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2. \quad (54)$$

Por fim, substituindo (44) e (54) na definição (43), tem-se a expressão do desvio padrão:

$$\Delta L_x = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [l(l+1) - m^2]}. \quad (55)$$

Analogamente:

$$\Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [l(l+1) - m^2]}. \quad (56)$$

E o produto resultaria em:

$$\Delta L_x \Delta L_y = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]. \quad (57)$$

Vamos voltar ao exemplo da partícula no autoestado $Y_{3,2}$. Substituindo $l = 3$ e $m = 2$ na equação (57), encontramos $\Delta L_x \Delta L_y = 4\hbar^2$. Este valor está de acordo com o resultado do princípio de incerteza, o qual prediz um produto maior que \hbar^2 : ver a equação (26).

7 A representação matricial do momento angular orbital

Revisão 1: Os harmônicos esféricos são funções normalizadas e ortogonais:

$$\begin{aligned} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} Y_{l',m'}^* Y_{l,m} d\Omega &= 1 \quad [\text{ se } l' = l \text{ e } m' = m] \\ &= 0 \quad [\text{ caso contrário }] \end{aligned} \quad (58)$$

Revisão 2: Os operadores componente z e quadrado do operador do momento angular orbital são definidos como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m} &= l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}; \\ \hat{L}_z Y_{l,m} &= m\hbar Y_{l,m}. \end{aligned} \quad (59)$$

Revisão 3: Os operadores de levantamento e de abaixamento são definidos como:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ Y_{l,m} &= C_+ Y_{l,m+1}; \\ \hat{L}_- Y_{l,m} &= C_- Y_{l,m-1};\end{aligned}\tag{60}$$

onde:

$$\begin{aligned}C_+ &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}; \\ C_- &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}.\end{aligned}\tag{61}$$

Revisão 4: Os operadores (60) são usados na definição dos operadores:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-); \\ \hat{L}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-).\end{aligned}\tag{62}$$

Com as revisões em mente, vamos determinar os elementos de matrizes do momento angular orbital, primeiro para o caso geral l , em seguida, para o caso específico $l = 1$.

◆ COMPONENTES DE MATRIZES

Componentes do operador quadrado do operador do momento angular orbital:

$$\begin{aligned}[\mathbf{L}^2]_{m',m} &= \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* (\hat{\mathbf{L}}^2) Y_{l,m} d\Omega \\ &= l(l+1)\hbar^2 \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* Y_{l,m} d\Omega \\ &= l(l+1)\hbar^2 \quad [\text{se } l' = l \text{ e } m' = m] \\ &= 0 \quad [\text{caso contrário}]\end{aligned}\tag{63}$$

Componentes do operador da componente z do operador do momento angular orbital:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z]_{m',m} &= \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* (\hat{L}_z) Y_{l,m} d\Omega \\
&= m\hbar \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* Y_{l,m} d\Omega \\
&= m\hbar \quad [\text{se } l' = l \text{ e } m' = m] \\
&= 0 \quad [\text{caso contrário}]
\end{aligned} \tag{64}$$

Componentes do operador de levantamento:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_+]_{m',m} &= \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* (\hat{L}_+) Y_{l,m} d\Omega \\
&= C_+ \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* Y_{l,m+1} d\Omega \\
&= C_+ \quad [\text{se } l' = l \text{ e } m' = m + 1] \\
&= 0 \quad [\text{caso contrário}]
\end{aligned} \tag{65}$$

Componentes do operador de abaixamento:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_-]_{m',m} &= \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* (\hat{L}_-) Y_{l,m} d\Omega \\
&= C_- \int_{\theta}^{\pi} \int_{\phi}^{2\pi} Y_{l',m'}^* Y_{l,m-1} d\Omega \\
&= C_- \quad [\text{se } l' = l \text{ e } m' = m - 1] \\
&= 0 \quad [\text{caso contrário}]
\end{aligned} \tag{66}$$

◆ EXEMPLO

Representação matricial do operador quadrado do operador do momento angular orbital, para $l = 1$:

$$\begin{array}{ccc}
m \rightarrow & 1 & 0 & -1 \\
& 1 & \begin{bmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{bmatrix} \\
\mathbf{L}^2 = & 0 & & \\
& -1 & & \\
\uparrow m' & & &
\end{array} \quad (67)$$

$$\mathbf{L}^2 = 2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \hbar^2. \quad (68)$$

Representação matricial do operador da componente z do operador do momento angular orbital, para $l = 1$:

$$\begin{array}{ccc}
m \rightarrow & 1 & 0 & -1 \\
& 1 & \begin{bmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{bmatrix} \\
\hat{L}_z = & 0 & & \\
& -1 & & \\
\uparrow m' & & &
\end{array} \quad (69)$$

$$\hat{L}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \hbar. \quad (70)$$

Representação matricial do operador de levantamento, para $l = 1$:

$$\begin{array}{ccc}
m \rightarrow & 1 & 0 & -1 \\
& 1 & \begin{bmatrix} 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\hat{L}_+ = & 0 & & \\
& -1 & & \\
\uparrow m' & & &
\end{array} \quad (71)$$

$$\hat{L}_+ = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \hbar. \quad (72)$$

Representação matricial do operador de abaixamento, para $l = 1$:

$$\hat{L}_- = \begin{matrix} m \rightarrow & 1 & 0 & -1 \\ & 1 & & \\ & 0 & & \\ & -1 & & \\ \uparrow m' & & & \end{matrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \hbar\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (73)$$

$$\hat{L}_- = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \hbar. \quad (74)$$

Por meio da definição (60), representação matricial do operador da componente x do operador do momento angular orbital, para $l = 1$:

$$\hat{L}_x = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \hbar. \quad (75)$$

Por meio da definição (60), representação matricial do operador da componente y do operador do momento angular orbital, para $l = 1$,

$$\hat{L}_y = \frac{\sqrt{2}}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \hbar. \quad (76)$$

Referências

- Heisenberg, W. (1927). *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*. Zeitschrift für Physik, Volume 43, Pages 172-198.
- Herbert Goldstein, Charles P. Poole, J. L. S. (2001). *Classical Mechanics*. Addison Wesley, ISBN 978-0201657029, 3rd edition.
- Liboff, R. (2002). *Introductory Quantum Mechanics*. Addison Wesley, ISBN 978-0805387148, 4th edition.

Robertson, H. (1929). *The Uncertainty Principle*. Physical Review, Volume 34 (1), Pages 163-164.

Thompson, W. J. (1994). *Angular Momentum: An Illustrated Guide to Rotational Symmetries for Physical Systems*. Wiley-VCH, ISBN 978-0471552642, 1st edition.