Aula 34 (13/Abr)

<u>Na aula de hoje:</u>

* Revisão das aulas anteriores.
* Teoria Geral do Momento Angular.
* Espectro dos operadores $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$.

Revisão das últimas aulas

* Aula 31 (teórica):
  - Simetria translação temporal.
  - Simetria rotação.
  - Simetrias discretas.

* Aula 32 (teórica assíncrona):
  - Simetrias discretas.
    - ↳ Paridade.
    - ↳ Translações discretas.

* Aula 33 (resolução exercícios).

Capítulo (9): Teoria Geral do Momento Angular

Refs.:
* Cohen, cap VI.
* Shankar, cap. 12

Fundamental em diversos problemas quânticos: partícula num potencial central (ex. átomo hidrogênio), spin, efeito Zeeman, magnetismo atômico, etc..

(9.1) Definições e notação

As propriedades do momento angular resultam das relações de comutação do momento angular

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} \cdot \hat{J}_k$$

(com $i, j, k = 1, 2, 3$) que no capítulo (8) vimos resulterem da não comutação de operadores
$x\ y\ z$

de rotação em torno de diferentes eixos, rotações essas geradas por $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$,

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\theta) = e^{-i\theta\, \vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}/\hbar}$$

onde $\vec{n}$ é o eixo em torno do qual rodamos, sendo $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ o operador (vetorial) de momento angular.

Vamos introduzir o operador

$$\boxed{\hat{J}^2 \equiv \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{J}} = \hat{J}_x^2 + J_y^2 + J_z^2}$$

o qual chamaremos operador momento angular total (ao quadrado).

É fácil ver que $\hat{J}^2$ é hermitico, pois $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ e $\hat{J}_z$ são hermiticos. Podemos tb mostrar que $\hat{J}^2$ é observável.

Mostremos que $\hat{J}^2$ comuta com $\hat{\vec{J}}$, i.e. com $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, e $\hat{J}_z$,

$$[\hat{J}^2, \hat{\vec{J}}] = 0,$$

que para $[\hat{J}^2, \hat{J}_z]$ resulta em

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}_x^2, \hat{J}_z] + [\hat{J}_y^2, \hat{J}_z] + \cancelto{0}{[\hat{J}_z^2, \hat{J}_z]}$$

$$= \hat{J}_x \overbrace{[J_x, J_z]}^{=-i\hbar J_y} + \overbrace{[J_x, J_z]}^{=-i\hbar J_y} J_x + J_y \overbrace{[J_y, J_z]}^{=i\hbar J_x} + \overbrace{[J_y, J_z]}^{=i\hbar J_x} J_y$$

$$= i\hbar\left(-\cancel{J_x J_y} - \cancel{J_y J_x} + \cancel{J_y J_x} + \cancel{J_x J_y}\right) = 0$$ ∎

E podemos mostrar analogamente $[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = 0 = [\hat{J}^2, \hat{J}_y]$.

Poderemos então escolher $\hat{J}^2$ e um dos componentes do $\hat{\vec{J}}$ para ~~fazerem~~ parte do C.C.O.C., que permitirá etiquetar base $\mathcal{E}$.

↳ Vamos escolher $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ (para fazerem parte do CCOC), e tentar encontrar base de $\mathcal{E}$ composta por auto-estados de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$.

Nota: Vamos usar $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ pois queremos sublinhar que todas estas conclusões são válidas para qualquer momento angular, seja este um momento angular orbital (tipicamente notado por $\underline{\underline{\hat{\vec{L}}}}$) ou um momento angular intrínseco (tipicamente notado por $\underline{\underline{\hat{\vec{S}}}}$, spin).

Em vez de trabalharmos com $\hat{J}_x$ e $\hat{J}_y$, vamos introduzir

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{J}_+ &\equiv \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- &\equiv \hat{J}_x - i\hat{J}_y \end{aligned}}$$

chamados de operadores escada, respectivamente operador levantador e operador abaixador.

Nota: São de certa forma análogos aos operadores de criação e destruição do Oscilador Harmônico Quântico, $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$.

Nota: $\hat{J}_+$ e $\hat{J}_-$ não são hermíticos, sendo na verdade hermíticos conjugados um do outro

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_- \quad \text{e} \quad \hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+$$

Algumas relações comutação

* $[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar \hat{J}_+$

$$* \left[\hat{J}_z, \hat{J}_-\right] = -\hbar \hat{J}_-$$

$$* \left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar \hat{J}_z$$

$$* \left[\hat{J}^2, \hat{J}_+\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_-\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_z\right] = 0$$

que são fáceis de demonstrar usando as relações comutação, $\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$.

Mostremos apenas a terceira,

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ = ?$$

que calculando cada termo separadamente resulta em

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + i\overbrace{(J_yJ_x - J_xJ_y)}^{=-i\hbar J_z} + J_y^2$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar \hat{J}_z \quad ,$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 - i\overbrace{(J_yJ_x - J_xJ_y)}^{=-i\hbar J_z} + J_y^2$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar \hat{J}_z \quad ,$$

e assim teremos o comutador

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = (\cancel{J_x^2} + \cancel{J_y^2} + \hbar J_z) - (\cancel{J_x^2} + \cancel{J_y^2} - \hbar J_z)$$

$$= 2\hbar \hat{J}_z$$

□

Notemos que podemos escrever $\hat{J}_\pm \hat{J}_\mp$ em termos apenas de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$:

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z ,$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z ,$$

que nos permite concluir rapidamente que podemos escrever

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + J_z^2 .$$

O valor esperado de $\hat{J}^2$ deverá ser positivo ou zero pois

$$\langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2}\langle \psi | J_+ J_- | \psi \rangle + \frac{1}{2}\langle \psi | J_- J_+ | \psi \rangle +$$

$$\langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle$$

$$= \frac{1}{2}\overbrace{\left| \hat{J}_- |\psi\rangle \right|^2}^{\geq 0} + \frac{1}{2}\overbrace{\left| \hat{J}_+ |\psi\rangle \right|^2}^{\geq 0} + \overbrace{\left| \hat{J}_z |\psi\rangle \right|^2}^{\geq 0} \geq 0 ,$$

o que implica que os auto-vals $\hat{J}^2$ sejam todos positivos ou zero, pois se $|\psi\rangle$ for auto-vec de $\hat{J}^2$, i.e. $\hat{J}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ e como

$$\langle\psi|\hat{J}^2|\psi\rangle \geq 0 \Rightarrow \lambda\overbrace{\langle\psi|\psi\rangle}^{=1} \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0.$$

Daqui em diante vamos optar por escrever os auto-vals de $\hat{J}^2$ como,

$$\lambda = j(j+1)\hbar^2 \quad , \quad j \geq 0$$

apenas porque simplificará.

<u>Nota</u>: Esta escolha é inteiramente legítima pois como $\lambda \geq 0$, só teremos uma raiz positiva ou zero da eqç anterior

$$\Rightarrow j^2 + j - \lambda/\hbar^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow j = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\lambda/\hbar^2}}{2}$$

único com $j \geq 0$

logo teremos apenas um $j \geq 0$ para cada $\lambda \geq 0$. A escolha de λ determina unicamente $j \geq 0$.

Para além de escrevermos auto-vals de $\hat{J}^2$ como $j(j+1)\hbar^2$ vamos escrever auto-vals $\hat{J}_z$ como $m\hbar$, onde m tal como j são números sem dimensões.

Note: O $\hbar^2$ no auto-val de $\hat{J}^2$ e $\hbar$ no auto val de $\hat{J}_z$ são consistentes com o facto de os $\hat{J}_i$ terem dimensões de $\hbar$

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

$$\Rightarrow [J_i] = [\hbar]$$

Vamos indexar os elementos da base de $\mathcal{E}$ (que são auto-estados comuns a $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$) em termos dos números quânticos j e m, escrevendo os kets com $|j, m\rangle$.

No entanto, em geral $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ não serão suficientes para formarmos um CCOC. Teremos em geral que incluir mais operadores, aos quais teremos que associar números quânticos adicionais quando formos indexar a base de $\mathcal{E}$.

Assim, vamos incluir um índice extra, k, na nossa indexação dos elementos da base de $\mathcal{E}$, $\{|k,j,m\rangle\}$, o que nos permitirá distinguir diferentes elementos da base de $\mathcal{E}$ com o mesmo par de números quânticos (j,m).

↳ $\underline{k}$ pode ser índice contínuo ou discreto, e até representar conjuntos de índices.

Assim, os eqs de auto-vals e auto-vecs de J^2 e J_z podem ser escritas

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

9.2 Auto-valores de $\hat{J}^2$ e de $\hat{J}_z$

Lema 1: Se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são auto-vals de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ associados ao ket $|k,j,m\rangle$, então j e m satisfazem

$$-j \leq m \leq j .$$

Demonstração: Notemos que como o quadrado da norma de $\hat{J}_+|k,j,m\rangle$ e $\hat{J}_-|k,j,m\rangle$ são não negativos, então

$$\left|\hat{J}_+|kjm\rangle\right|^2 \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \langle kjm|\overbrace{\hat{J}_-\hat{J}_+}^{=\hat{J}^2-\hat{J}_z^2-J_z\hbar}|kjm\rangle \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \left[j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2\right]\overbrace{\langle kjm|kjm\rangle}^{=1} \geq 0$$

$$\Leftrightarrow j(j+1) - m(m+1) \geq 0$$

$$\Leftrightarrow (j-m)(j+m+1) \geq 0$$

onde assumimos que os $|kjm\rangle$ estão normalizados. De forma semelhante

$$\left|\hat{J}_-|kjm\rangle\right|^2 \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \langle kjm|\overbrace{\hat{J}_+\hat{J}_-}^{=\hat{J}^2-\hat{J}_z^2+J_z\hbar}|kjm\rangle \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \left[j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2\right]\overbrace{\langle kjm|kjm\rangle}^{=1} \geq 0$$

$$\Leftrightarrow j(j+1) - m(m-1) \geq 0$$

$$\Leftrightarrow (j-m+1)(j+m) \geq 0$$

o que implica que da primeira condição temos

$$-(j+1) \leq m \leq j ,$$

sendo que da segunda

$$-j \leq m \leq j+1 .$$

condições que são satisfeitas simultaneamente se e só se

$$-j \leq m \leq j$$

$\square$

Lema 2: Seja $|k\,j\,m\rangle$ auto-vec de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$, então:

(i) Se $m=-j$, então $\hat{J}_-|k,j,-j\rangle = 0$.

(ii) Se $m>-j$, então $\hat{J}_-|k\,j\,m\rangle$ é auto-vec não-nulo de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-1)\hbar$.

Demonstração

(i)
$$\left|\hat{J}_-|k,j,-j\rangle\right|^2 = \langle k,j,-j|\overbrace{\hat{J}_+\hat{J}_-}^{=\hat{J}^2-\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z}|k,j,-j\rangle$$

$$= j(\cancel{j}+\cancel{1})\hbar^2 - \cancel{(-j)^2}\hbar^2 + \hbar(\cancel{-j})\hbar = 0$$

Como norma ao quadrado de vector só é zero se esse vector for nulo, então $\hat{J}_-|k,j,-j\rangle = 0$. $\square$

(ii) Assumamos $m > -j$. Então, podemos mostrar $\hat{J}_-|kjm\rangle$ é vector não nulo pois a sua norma ao quadrado é maior do que zero, i.e.

$$\left|\hat{J}_-|kjm\rangle\right|^2 = \langle kjm|\overbrace{\hat{J}_+\hat{J}_-}^{=\hat{J}^2-\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z}|kjm\rangle$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m(m-1)\hbar^2 \overset{m>-j}{>} 0$$

Para mostrar que $\hat{J}_-|kjm\rangle$ é autovec do $\hat{J}^2$ basta usar $[\hat{J}^2, \hat{J}_-] = 0$,

$$\hat{J}^2\left(\hat{J}_-|kjm\rangle\right) = \hat{J}_-\hat{J}^2|kjm\rangle$$

$$= j(j+1)\hbar^2 . \left(\hat{J}_-|kjm\rangle\right)$$

que mostra que $J_-|kjm\rangle$ é auto-estado de $\hat{J}^2$ com auto-val $j(j+1)\hbar^2$.

Para mostrar mostrar que é auto-vec de J_z usamos $[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar\hat{J}_-$,

$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_-|kjm\rangle\right) = \hat{J}_-\hat{J}_z|kjm\rangle - \hbar\hat{J}_-|kjm\rangle$$

$$= (m-1)\hbar\left(\hat{J}_-|kjm\rangle\right)$$

$\square$

Lema 3: Seja $|k\,j\,m\rangle$ auto-vec de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$, então:

(i) Se $m = +j$, então $\hat{J}_+|k, j, +j\rangle = 0$.

(ii) Se $m < +j$, então $\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle$ é auto-vec não-nulo de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $(m+1)\hbar$.

Demonstração

(i) Argumento similar à demonstração anterior (Lema 2).

(ii) Se $m < j$, similarmente conseguimos mostrar que $|\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle|^2 > 0$ e que

$[\hat{J}^2, \hat{J}_+] = 0$

$$\hookrightarrow \hat{J}^2(\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle) = \hat{J}_+\hat{J}^2|k\,j\,m\rangle = j(j+1)\hbar^2(\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle)$$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = +\hbar\hat{J}_+$

$$\hookrightarrow \hat{J}_z(\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle) = (\hat{J}_+\hat{J}_z + \hbar\hat{J}_+)|k\,j\,m\rangle = (m+1)\hbar(\hat{J}_+|k\,j\,m\rangle)$$

$\blacksquare$

Vamos agora determinar espectro de $\hat{J}^2$ e de $\hat{J}_z$, que consistirá em determinar quais os valores de j e m são admitidos em $j(j+1)\hbar^2$ e em $m\hbar$.

Suponhamos $|k\, j\, m\rangle$ é auto-vec não nulo de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Do lema 1 temos $-j \leq m \leq j$. Haverá então um número inteiro p tal que

$$-j \leq m - p \leq -j+1 \, .$$

Se agora actuarmos sucessivamente com $\hat{J}_-$ em $|k\, j\, m\rangle$ baixaremos auto-val de $\hat{J}_z$ (lema 2)

$$|k, j, m\rangle \longrightarrow m\hbar$$

$$\hat{J}_-|k, j\, m\rangle \longrightarrow (m-1)\hbar$$

$$(\hat{J}_-)^2|k\, j\, m\rangle \longrightarrow (m-2)\hbar$$

$$\vdots \qquad\qquad\qquad \vdots$$

$$(\hat{J}_-)^p|k\, j\, m\rangle \longrightarrow (m-p)\hbar$$

que ainda tem auto-val maior do que $-j\hbar$. Mas se aplicarmos $\hat{J}_-$ mais uma vez teremos

$$(\hat{J}_-)^{p+1}|kjm\rangle \longrightarrow (m-p-1)\hbar < -j\hbar,$$

que está em <u>contradição com lema 1</u>!!

↳ lema 1: $-j\hbar \leq m\hbar \leq j\hbar$

Na próxima aula vamos ver como resolver esta contradição com o lema 1.