

Aula 36 (15/Abr)

Na aula de hoje:

- * Revisão das aulas anteriores.
- * Espectro dos operadores \hat{J}^2 e \hat{J}_z .
- * Representações dos $|k, j, m\rangle$.
- * Exemplo do momento angular orbital
- * Harmônicos esféricos.

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$$

Revisão das últimas aulas

- * Teoria Geral do Momento Angular.
- * Operadores escada \hat{J}_+ e \hat{J}_- .
- * Espectro dos operadores \hat{J}^2 e \hat{J}_z .

Capítulo 9: Teoria Geral do Momento Angular

9.2 Auto-valores de \hat{J}^2 e \hat{J}_z (cont.)

Vimos no final da aula anterior que se supusermos que $|k, j, m\rangle$ é auto-vec não

auto de \hat{J}^2 e \hat{J}_z com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Como do lema 1 temos $-j \leq m \leq j$, haverá então um número inteiro p tal que

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

Actuando sucessivamente com \hat{J}_- em $|k, j, m\rangle$ (pelo 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

\vdots

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

Mas se aplicarmos \hat{J}_- mais uma vez

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

que está em contradição com lema 1!!

A forma de resolver esta contradição é requerer

$$\underline{\underline{m-p = -j}}$$

(1)

pois se actuarmos uma vez adicional

com \hat{J}_- teremos vector nulo, tendo daí em diante sempre vector nulo para mais actuações de \hat{J}_- .

Argumentos inteiramente análogos para \hat{J}_+ actuando em $|k, j, m\rangle$

$$(\hat{J}_+)^q |k, j, m\rangle \rightarrow (m+q)\hbar \leq j\hbar,$$

$$(\hat{J}_+)^{q+1} |k, j, m\rangle \rightarrow (m+q+1)\hbar > j\hbar,$$

para $j-1 < m+q \leq j$ com q inteiro, que está em contradição com lema 1, e que pode ser resolvido requerendo

$$m+q = j. \quad (2)$$

Assim, temos que p e q são dois inteiros tais que $(2) - (1)$

$$\Rightarrow q+p = 2j \Rightarrow j = \frac{p+q}{2}$$

Logo j terá valores inteiros (se $q+p$ é par) ou semi-inteiros (se $q+p$ é ímpar).

Fica então claro que, actuando com \hat{J}_+ e \hat{J}_- nestes kets, os valores admissíveis de m serão

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, \dots, j-1, j.$$

Resumindo:

Se $\hat{\vec{J}}$ for momento angular arbitrário obedecendo as relações de comutação $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$, então auto-valores de \hat{J}^2 e \hat{J}_z serão $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$, onde

↳ j poderá ser $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$, que num sistema físico particular não precisam ser todos realizados.

↳ Para dado j , teremos todos os m seguintes: $-j, -j+1, \dots, j$.

(9.3) Auto-lectores \hat{J}^2 e \hat{J}_z

Vamos agora ver como construir os auto-
lectores de \hat{J}^2 e \hat{J}_z .

Começamos por considerar um par (j, m)
que identifica os kets $|k, j, m\rangle$ do sub-es-
paço $E(j, m)$, que são auto-lects de \hat{J}^2
e \hat{J}_z com auto-vals $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$.

O sub-espaço $E(j, m)$ tem em geral
dimensão $g(j, m)$ pois em geral \hat{J}^2
e \hat{J}_z não formam C.O.C. por si só.

↳ $\{|k, j, m\rangle\}$ com $k = 1, 2, \dots, g(j, m)$
que podemos escolher como
sendo base ortonormal de
 $E(j, m)$.

Se $m \neq j$ existe sub-espaço $E(j, m+1)$ cujos $\{|k, j, m+1\rangle\}$ estão relacionados com $\{|k, j, m\rangle\}$ de base de $E(j, m)$

$$\underbrace{|k, j, m+1\rangle}_{\hookrightarrow \in E(j, m+1)} \propto \hat{J}_+ \underbrace{|k, j, m\rangle}_{\hookrightarrow \in E(j, m)}$$

Lema 4: Seja $k_1 \neq k_2$ tal que $\langle k_1 j m | k_2 j m \rangle = 0$, então os vetores $\hat{J}_\pm |k_1 j m\rangle$ e os de $\hat{J}_\pm |k_2 j m\rangle$ serão ortogonais.

Demonstração: O produto escalar

$$\begin{aligned} \langle k_1 j m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | k_2 j m \rangle &= \langle k_1 j m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) | k_2 j m \rangle \\ &= [j(j+1)\hbar^2 - m(m+1)\hbar^2] \underbrace{\langle k_1 j m | k_2 j m \rangle}_{\ll \delta_{k_1 k_2}} \end{aligned}$$

logo $\hat{J}_\pm |k_1 j m\rangle$ e $\hat{J}_\pm |k_2 j m\rangle$ serão ortogonais se $k_1 \neq k_2$. \square

Lema 5: Podemos obter base ortonormal de $E(j, m \pm 1)$ a base de $E(j, m)$ fazendo

$$|k, j, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} \hat{J}_{\pm} |k, j, m\rangle$$

Demonstração: Do Lema 4, se base de $E(j, m)$ está normalizada, então se $k_1 = k_2 = k$ temos

$$\langle k, j, m | \hat{J}_{-} \hat{J}_{+} | k, j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \overbrace{\langle k, j, m | k, j, m \rangle}^1$$

$$\Rightarrow |k, j, m+1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) + m(m+1)}} \hat{J}_{+} |k, j, m\rangle$$

Logo conjunto $\{|k, j, m \pm 1\rangle\}$ são ortonormais. Mas ainda não provamos que são base de $E(j, m \pm 1)$.

Suponhamos que existe ket $|\alpha, j, m+1\rangle$ ortogonal a todos $|k, j, m+1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) + m(m+1)}} \hat{J}_{+} |k, j, m\rangle$. Então $\hat{J}_{+} |\alpha, j, m+1\rangle \propto |\alpha, j, m\rangle$, que terá que ser ortogonal a todos os $\{|k, j, m\rangle\}$ que formam base $E(j, m)$. Mas isto é impossível.

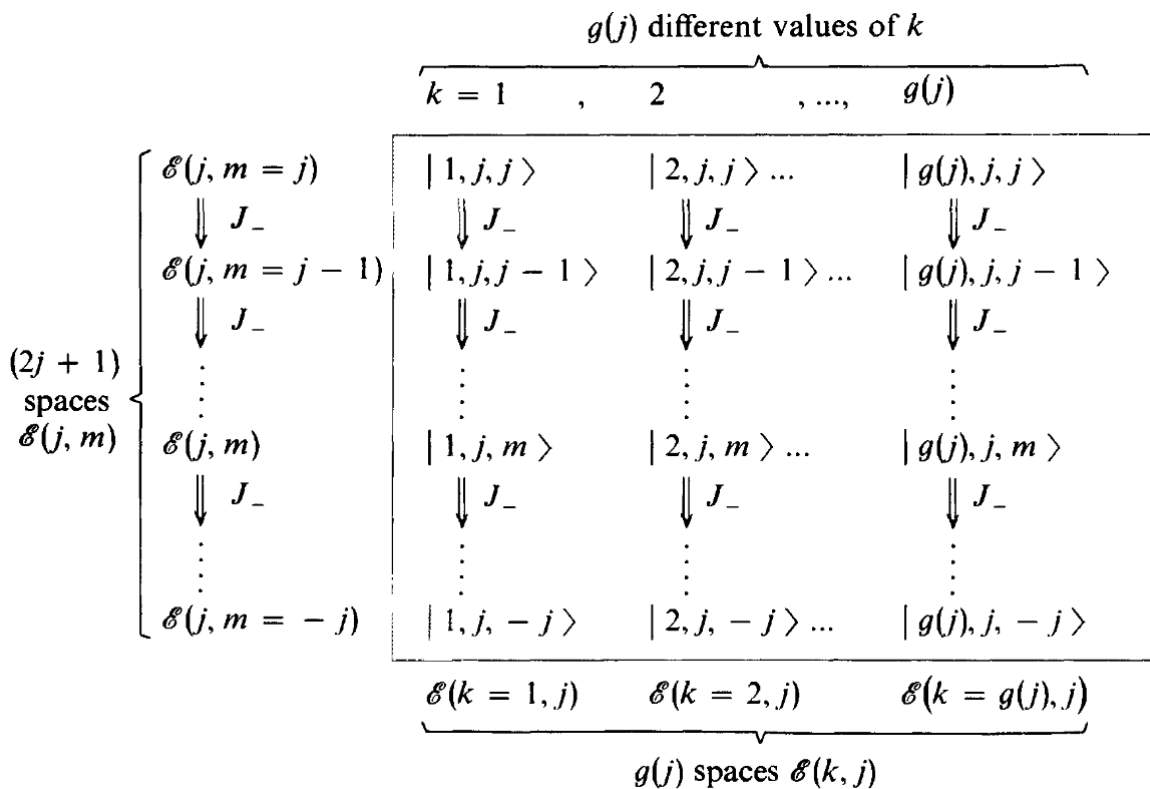
O conjunto $\{|k, j, m\rangle\}$ é base completa de $\mathcal{E}(j, m)$ por hipótese de partida.

↳ Não pode haver $|k, j, m+1\rangle$ ortogonal a todos $|k, j, m+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{J}_+ |k, j, m\rangle$
 $\Rightarrow \{|k, j, m+1\rangle\}$ formam base $\mathcal{E}(j, m+1)$.

Nota: Fica claro que a dimensão dos sub-espaços $\mathcal{E}(j, m+1)$, $\mathcal{E}(j, m)$ e $\mathcal{E}(j, m-1)$ são iguais, então

$$g(j, m) = g(j).$$

Método padrão de construir estes autovalores dos sub-espaços $\mathcal{E}(j, m)$:



Note: Os nomes bases físicas e estes conjuntos
são construídos.

Note: Taremos as seguintes relações de or-
tonormalização e de fechamento:

$$\langle \kappa, j, m | \kappa', j', m' \rangle = \delta_{\kappa \kappa'} \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{m, m'} ,$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{+j} \sum_{\kappa=1}^{g(j)} |\kappa, j, m\rangle \langle \kappa, j, m| = 1 ,$$

onde sabemos que auto-vals de obser-
vável \hat{J}^2 e \hat{J}_z com diferentes auto-vals
são necessariamente ortogonais.

Note: O índice κ corresponderá aos núme-
ros quânticos associados a outras
observáveis da C.C.O.C., $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$, para
além de \hat{J}^2 e \hat{J}_z .

Por simplicidade consideremos apenas
 \hat{A} , C.C.O.C. = $\{\hat{A}, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$,

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

Então sub-espaço $E(j, m)$ é dito global-
mente invariante pela ação de \hat{A} , i.e.
 $\hat{A}|\kappa, j, m\rangle \in E(j, m)$ se $|\kappa, j, m\rangle \in E(j, m)$, pois

$$\hat{J}^2(\hat{A}|\kappa_j m\rangle) = \hat{A}\hat{J}^2|\kappa_j m\rangle = j(j+1)\hbar^2(\hat{A}|\kappa_j m\rangle),$$

$$\hat{J}_z(\hat{A}|\kappa_j m\rangle) = \hat{A}\hat{J}_z|\kappa_j m\rangle = m\hbar(\hat{A}|\kappa_j m\rangle),$$

logo $\hat{A}|\kappa_j m\rangle \in E(j, m)$.

Nota: Os auto-vals de \hat{A} dependerão apenas de κ e de j , não dependendo de m , i.e.

$$\hat{A}|\kappa_j m\rangle = a_{\kappa, j}|\kappa_j m\rangle.$$

É fácil mostrar que se começarmos por $m=j \in E(j, j)$ então é natural escrever

$$\hat{A}|\kappa, j, j\rangle = a_{\kappa, j}|\kappa, j, j\rangle,$$

e notando que $[\hat{A}, \hat{J}_x] = [\hat{A}, \hat{J}_y] = 0$,
então $[\hat{A}, \hat{J}_{\pm}] = 0$, logo

$$\hat{A}\hat{J}_{-}|\kappa, j, j\rangle = \hat{J}_{-}\hat{A}|\kappa, j, j\rangle = a_{\kappa, j}\hat{J}_{-}|\kappa, j, j\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A}|\kappa, j, j-1\rangle = a_{\kappa, j}|\kappa, j, j-1\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A}|\kappa_j m\rangle = a_{\kappa, j}|\kappa_j m\rangle.$$

Nota: Há casos em que $a_{\kappa, j} = a_{\kappa}$. Às vezes de Hidrogénio, \hat{H} .

Os sub-espaços $E(j, m)$ tem algumas vantagens:

↳ Não sabemos em geral dimensão de $E(j, m)$, $g(j, m)$. Depende do sistema físico.

↳ Os sub-espaços não são globalmente invariantes pela acção de $\hat{\mathcal{J}}$ (por ex \mathcal{J}_+ aplicado a $E(j, m)$ leva-nos para $E(j, m+1)$).

Útil introduzir outro tipo de sub-espaços onde fixamos k e j , $E(k, j)$

↳ dimensão conhecida, $2j+1$, para qualquer valor de k .

↳ $E(k, j)$ são globalmente inv. pela acção de $\hat{\mathcal{J}}$ (só mudam m).

Os operadores do tipo $\hat{F}(\hat{\mathcal{J}})$ serão matrizes diagonais por blocos nestes espaços (globalmente inv. pela acção de $\hat{\mathcal{J}}$).

	$\mathcal{E}(k, j)$	$\mathcal{E}(k', j)$	$\mathcal{E}(k', j')$...
$\mathcal{E}(k, j)$	matrix $(2j+1) \times (2j+1)$	0	0	0
$\mathcal{E}(k', j)$	0	matrix $(2j+1) \times (2j+1)$	0	0
$\mathcal{E}(k', j')$	0	0	matrix $(2j'+1) \times (2j'+1)$	0
\vdots	0	0	0	0

Como sabemos que

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

$$\hat{J}_z |k, j, m\rangle = m \hbar |k, j, m\rangle,$$

$$\hat{J}_{\pm} |k, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k, j, m\rangle,$$

então os elementos de matriz serão

$$\langle k, j, m | \hat{J}^2 |k', j', m'\rangle = j'(j'+1) \hbar^2 \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$\langle k, j, m | \hat{J}_z |k', j', m'\rangle = m' \hbar \cdot \delta_{kk'} \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}$$

$$\langle k, j, m | \hat{J}_{\pm} |k', j', m'\rangle = \hbar \sqrt{j'(j'+1) - m'(m' \pm 1)} \cdot \delta_{kk'} \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{m, m' \pm 1}$$

que dependem apenas de j e m e não de k .

Podemos escrever $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y$ como

$$\langle \kappa, j, m | \hat{J}_x | \kappa', j', m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)} \cdot \delta_{m, m'+1} + \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'-1)} \cdot \delta_{m, m'-1} \right] \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{jj'}$$

$$\langle \kappa, j, m | \hat{J}_y | \kappa', j', m' \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)} \cdot \delta_{m, m'+1} - \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'-1)} \cdot \delta_{m, m'-1} \right] \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{jj'}$$

Para poderemos construir as matrizes correspondentes a operadores $\hat{F}(\hat{\vec{J}})$ resta-nos apenas calcular as matrizes $(\hat{J}_i)^{(j)}$ para algum j .

Exemplo: Caso $j=0$, sub-espaço $\mathcal{E}(\kappa, j=0)$ tem dimensão $2j+1=1$, pois $m=0$. Então as matrizes serão $(\hat{J}_i)^{(0)}$ números,

$$(\hat{J}_z)^{(0)} = 0 = (\hat{J}_x)^{(0)} = (\hat{J}_y)^{(0)}$$

Exemplo: Caso $j = 1/2$, sub-espaço $E(\kappa, j=1/2)$ tem dimensão $2j+1=2$ ($m = \pm 1/2$). As matrizes $(\hat{J}_i)^{(1/2)}$ serão 2×2

$$(\hat{J}_z)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \text{base } \begin{pmatrix} +1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{J}_x)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(\hat{J}_y)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Exemplo: Caso $j = 1$, sub-espaço $E(\kappa, j=1)$ tem dimensão $2j+1=3$ ($m = -1, 0, 1$). As matrizes serão 3×3

$$(\hat{J}_z)^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(\hat{J}_x)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(\hat{J}_y)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

9.4 Aplicações ao Momento Angular Orbital

Vamos agora aplicar estes conceitos ao caso concreto do momento angular orbital, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}}$, de uma partícula sem spin.

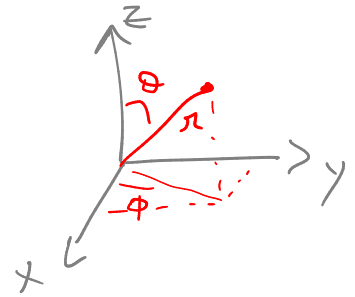
Nota: Usaremos $\hat{\mathbf{L}}$ e l em vez de $\hat{\mathbf{J}}$ e j , para identificar este momento angular como momento angular orbital.

Vamos ver que auto-vals de $\hat{\mathbf{L}}^2$ serão $l(l+1)\hbar^2$ com $l = 0, 1, 2, \dots$, sendo o $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l$.

Vamos também mostrar qual a forma das f.o. dos auto-estados comuns a $\hat{\mathbf{L}}^2$ e \hat{L}_z .

Vamos trabalhar na repres. $\{|\vec{r}\rangle\}$ e coordenadas esféricas

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$



$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \phi = \arctg(y/x) \\ \theta = \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} r \geq 0 \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \phi < 2\pi \end{cases}$$

$$\begin{aligned} d^3\vec{r} &= dx dy dz = r^2 \cdot dr \cdot d\Omega \\ &= r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \end{aligned}$$

9.4.1) Operadores de momento angular orbital em coordenadas esféricas

Os operadores $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ em coordenadas cartesianas são, na repres. $\{|\vec{r}\rangle\}$,

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Já em coordenadas esféricas, têm a forma

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}.$$

Destas expressões \hat{L}^2 e \hat{L}_{\pm} são trivialmente obtidos, tendo por isso

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right),$$

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right).$$

Nesta representação as f. d. s. são identificadas por $\psi(r, \theta, \phi)$.

Como \hat{L}^2 e \hat{L}_z não dependem de r na sua forma diferencial (em coordenadas esféricas), podemos então ver r como um parâmetro e escrever os auto-estados de \hat{L}^2 e de \hat{L}_z como

$$\psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = f(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi).$$

Podemos então eliminar $f(r)$ das eqs de auto-valor e auto-vec de \hat{L}^2 e \hat{L}_z ,

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) &= l(l+1) \hbar^2 \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) \\ \Rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) f(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) &= \\ &= l(l+1) \hbar^2 \cdot f(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned}$$

$$\hat{L}_z \psi_{lm}(\pi, \theta, \phi) = m \hbar \cdot \psi_{lm}(\pi, \theta, \phi)$$

$$\Rightarrow -i \hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \cancel{f(\pi)} \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = m \hbar \cdot \cancel{f(\pi)} \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

e assim podemos escrever estas equas de auto-valor e auto-vec como

$$L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) ,$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = m \hbar Y_l^m(\theta, \phi) .$$