Momento Angular

Ney Lemke

Mecânica Quântica

2013

Mecânica Quântica em 3D

$$H\psi(\vec{r}) = \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Vamos nos concentrar em
$V(\vec{r}) = V(r)$: problemas de forças centrais

Momento Angular

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$L_z = p_y x - y p_x$$

Princípio da Indução

Para demonstrar que uma determinada propriedade vale para todos os números naturais basta mostrar que:

1. a propriedade vale para $n = 1$
2. se a propriedade vale para $n - 1$ vale para n

Teorema:

$$[x^n, p_x] = i\hbar n x^{n-1}$$

$$[x, p_x] = i\hbar$$

Por indução:
Vale para $n = 1$

$$[x^1, p_x] = i\hbar 1 x^0$$

Ok

Teorema:

Se valer para $n-1$ vale para n.

$$[x^{n-1}, p_x] = i\hbar(n-1)x^{n-2}$$

$$[x^n, p_x] = x^{n-1}xp_x - p_x x x^{n-1} = x^{n-1}[x, p_x] + x^{n-1}p_x x - p_x x^{n-1} x$$

$$= i\hbar x^{n-1} + [x^{n-1}, p_x]x = i\hbar x^{n-1} + i\hbar(n-1)x^{n-1} = i\hbar n x^n$$

Ok.
Então vale para todos.

Corolários:

$$[f(x), p] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$[x, f(p)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p}$$

Comutadores

$$[H, L_z] = \left[\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right), p_y x - p_x y\right]$$

$$\frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, p_y x - p_x y\right] + \left[V(r), p_y x - p_x y\right]$$

$$= -[p_y^2, y]\frac{p_x}{2m} + [p_x^2, x]\frac{p_y}{2m} + [V(r), p_y x - pxy]$$

$$= \frac{-i\hbar p_y p_x + i\hbar p_y p_x}{2m} - y[V(r), p_x] + x[V(r), p_y]$$

$$[H, L_z] = -y\frac{\partial V}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + x\frac{\partial V}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y} = -\frac{xy}{r}\frac{\partial V}{\partial r} + \frac{xy}{r}\frac{\partial V}{\partial r} = 0$$

Comutadores

$$[H, L^2] = [H, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [H, L_x^2] + [H, L_y^2] + [H, L_z^2]$$

$$= [H, L_x]L_x + L_x[H, L_x] + [H, L_y]L_y + L_y[H, L_y] + [H, L_z]L_z + L_z[H, L_z]$$

$$= 0$$

Comutadores

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$$

$$= yp_x[p_z, z] + x[z, p_z]p_y$$

$$= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

Comutadores

$$[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2]$$
$$= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + L_y[L_z, L_y]$$
$$= i\hbar L_x Ly + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y = 0$$

Autoestados e autovalores

Temos neste caso dois operadores que comutam L^2 e L_z os nossos autoestados serão caracterizados por dois índices: l e m.

$$L^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle$$
$$L_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$$

$$l, m \in \mathbb{R}$$

$$\langle l'm'|lm\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

nada especial em relação a z.

Operadores Escada

$$L_\pm = L_x \pm iL_y$$

$$[L_+, L_-] = [L_x + iL_y, L_x - iL_y]$$

$$= i[L_y, L_x] - i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z$$

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x \pm iL_y] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y]$$

$$= i\hbar L_y \mp i(i\hbar L_x) = \pm\hbar(iL_x \pm L_y) = \pm\hbar L_\pm$$

Operadores Escada

$$
\begin{aligned}
[L^2, L_\pm] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x \pm iL_y] \\
&= [L_x^2, \pm L_y] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] + [L_z^2, i \pm L_y] \\
&= \pm i\hbar L_x L_z \pm i\hbar L_z L_x + i\hbar L_y L_z + i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y - i\hbar L_y L_z \mp i\hbar L_z L_x \mp i\hbar L_x L_z \\
&= 0
\end{aligned}
$$

Operadores Escada

$$L_+L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y]$$

$$= L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$$

$$L_-L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$$

$$L^2 = L_+L_- - L_z^2 - \hbar L_z$$

$$L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$$

Operadores Escada

$$\langle ml|L_z^2|ml\rangle \geq 0$$

$$\langle ml|L^2|ml\rangle \geq 0$$

Também vale pois é a soma de três números positivos.

$$l(l+1) \geq 0$$

Temos duas opções que são equivalente fisicamente: $l > 0$ ou $l < -1$. Vamos tomar $l > 0$

Operadores Escada

$$L^2 L_\pm|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)L_\pm|lm\rangle$$

$L_\pm|lm\rangle$ é autoestado de L^2

$$L_z L_+|lm\rangle = (L_+L_z + \hbar L_+)|lm\rangle = \hbar(m+1)L_+|lm\rangle$$

$$L_z L_-|lm\rangle = (L_-L_z - \hbar L_-)|lm\rangle = \hbar(m-1)L_-|lm\rangle$$

$$L_+|lm\rangle = C_+(l,m)|lm+1\rangle$$

$$L_-|lm\rangle = C_-(l,m)|lm-1\rangle$$

Autovalores

$$\langle lm|L_- = \langle l(m+1)|C_+^*(l,m)$$

$$\langle lm|L_-L_+|lm\rangle = |C_+(l,m)|^2\langle lm+1|lm+1\rangle = |C_+(l,m)|^2$$

$$|C_+(l,m)|^2 = \langle lm|L^2 - L_z^2 - \hbar L_z|lm\rangle$$

$$= \hbar^2[(l(l+1) - m^2 - m] = \hbar^2(l-m)(l+m+1)$$

Autovalores

$$C_+ = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}$$

$$C_- = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

$$\langle lm|L_-L_+|lm\rangle \geq 0$$

$$\langle lm|L_+L_-|lm\rangle \geq 0$$

$$\langle lm|L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z|lm\rangle \geq 0$$

Autovalores

$$[(l(l+1) - m(m \mp 1)] \geq 0$$

$$m(m+1) \leq l(l+1)$$

Os valores de m que satisfazem essa equação são:

$$-l-1 \leq m \leq l$$

Autovalores

$$[(l(l+1)-m(m\mp 1)] \geq 0$$

$$m(m-1) \leq l(l+1)$$

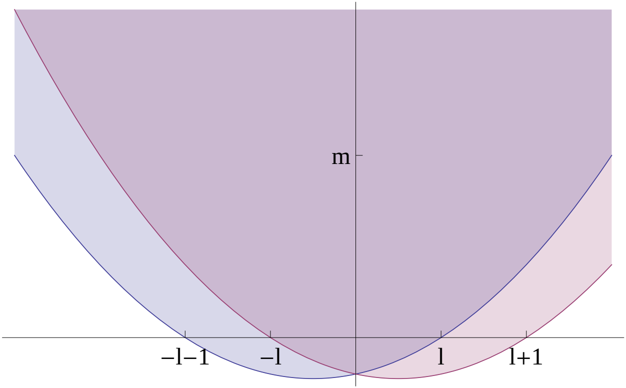
Os valores de m que satisfazem essa equação são:

$$-l \leq m \leq l+1$$

Conclusão

$$-l \le m \le l$$

Out[24]=



Conclusão

$$L_-|l-l\rangle = C_-(l,-l)|l(-l-1)\rangle = \sqrt{(l-l)(2l+1)}|l(-l-1)\rangle = 0$$

$$L_+|l-l\rangle = C_+(l,l)|l(l+1)\rangle = \sqrt{(l-l)(2l+1)}|l(-l-1)\rangle = 0$$

Quais são os possíveis valores de l?
m varia no mínimo em uma unidade, para ir de $-l$ até l precisamos de $2l$ passos. Se $2l$ é impar l é semi-inteiro, se $2l$ é par l é inteiro.

Representação em Posição

É mais conveniente trabalhar em coordenadas esféricas. Para isto vamos escrever os operados relevantes nestas coordenadas.

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad \theta = \tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} \quad \phi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$

Representação em Posição

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{xz}{r^2\sqrt{x^2+y^2}} \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2+y^2}$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{yz}{r^2\sqrt{x^2+y^2}} \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{x}{x^2+y^2}$$

Representação em Posição

$$x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} =$$

$$= \left(\frac{yx - xy}{r}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{xyz - xyz}{r^2(x^2+y^2)}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{x^2+y^2}{x^2+y^2}\right)\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

Representação em Posição

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

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

Representação em Posição

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \langle \theta\phi | lm \rangle$$

$$I = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \sin\theta |\theta\phi\rangle\langle\theta\phi|$$

$$\langle \theta'\phi' | \theta\phi \rangle = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta')\delta(\phi - \phi')$$

Autofunções

$$\langle\theta\phi|L_z|lm\rangle = \hbar m\langle\theta\phi|lm\rangle = \hbar m Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$L_z Y_{lm} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial Y_{lm}}{\partial\phi} = \hbar m Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = F(\theta)e^{im\phi}$$

Autofunções

$$L_+|ll\rangle = 0$$

$$\langle\theta\phi|L_+|ll\rangle = 0$$

$$\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(e^{il\phi}F(\theta)\right) = 0$$

$$\frac{\partial F(\theta)}{\partial\theta} = \frac{l}{\tan\theta}F(\theta)$$

$$F(\theta) = (\sin\theta)^l$$

Autofunções

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = CL_-^{l-m}(e^{il\phi}\sin\theta)^l$$

$$= Ce^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^{l-m}[e^{il\phi}\sin^l\theta]$$

Normalização

C pode ser obtido normalizando a função.

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} d\theta d\phi \sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\phi) Y^*_{lm}(\theta,\phi) = 1$$

Esféricos Harmônicos

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_{11} = \frac{1}{2} e^{i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\theta) \quad Y_{10} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_{1-1} = -\frac{1}{2} e^{-i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\theta)$$

Esféricos Harmônicos

$$Y_{22} = \frac{1}{4} e^{2i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2(\theta) \quad Y_{21} = -\frac{1}{2} e^{i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos(\theta)\sin(\theta)$$

$$Y_{20} = \frac{1}{16}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(6\cos(2\theta)+2) \quad Y_{2-1} = \frac{1}{4} e^{-i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin(2\theta)$$

$$Y_{2-2} = \frac{1}{4} e^{-2i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2(\theta)$$

$|Y_{lm}|^2$