Rotações Infinitesimais em Mecânica Quântica

Sabemos que na física clássica, rotações são dadas por matrizes ortogonais $R \in SO(3)$ (em geral)
Mas como isso se da na mecânica quântica? Em geral; dada uma rotação clássica digamos assim
R teremos o seu operador análogo no espaço de Hilbert $\underline{D(R)}$ tal que:

$$|\alpha\rangle_R = D(R)\,|\alpha\rangle$$

estado 'rodado' pelo operador $D(R)$

operador de rotação

estado inicial ao qual aplicamos a rotação.

Note que R sempre é uma matriz 3x3; no entanto a forma de $D(R)$ depende da dimensionalidade do espaço de Hilbert que estamos considerando.

Vamos pensar primeiramente em rotações infinitesimais; com o intuito de analisar quem é o gerador de rotações chegando em algo muito parecido c/ a mecânica clássica (momento angular)

Vale lembrar que o gerador infinitesimal do operador de translação era o momento.

Em geral é de costume escrever uma operação infinitesimal como:

$$U_\epsilon = 1 - i G \epsilon$$

operador hermitiano $\longrightarrow$ se tivermos uma Translação infinitesimal

Posição dx': $G \to \frac{P_x}{\hbar}$, $\epsilon \to dx'$

Temporal dt': $G \to \frac{H}{\hbar}$, $\epsilon \to dt'$

Para uma rotação definimos de acordo c/ a mecânica clássica:

$$G \to \frac{J_k}{\hbar}, \quad \epsilon \to d\phi$$

Operador Momento Angular

rotação de um angulo $d\phi$ em torno do eixo k.

Logo teremos então:

$$D(\hat{n}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\vec{J}\cdot\hat{n}}{\hbar}\right)d\phi$$

rotação infinitesimal em torno do eixo que é caracterizado pelo vetor normal $\hat{n}$.

Podemos pensar agora em uma rotação finita de um angulo ϕ consistida por N vezes a rotação infinitesimal $\frac{d\phi}{N}$ (angulo de rotação a cada passo) e digamos que seja por ex em torno do eixo Z; logo $\underline{\vec{J}\cdot\hat{Z} = J_z}$; assim como rotações clássicas rotacionar por R_1 e depois por R_2 é a mesma coisa que rotacionar por $R_1 R_2$ (note que não é a mesma coisa de rotacionar $R_2 R_1$). Ou seja a rotação será $\left[D(\hat{n}, \frac{d\phi}{N})\right]^N$ e para que seja uma rotação de fato e não apenas infinitesimal podemos tirar o limite em que $N \to \infty$:

$$D_z(\phi) = \lim_{N\to\infty}\left[D(\hat{z}, \tfrac{\phi}{N})\right]^N = \lim_{N\to\infty}\left[1 - i\left(\frac{J_z}{\hbar}\right)\left(\frac{\phi}{N}\right)\right]^N$$

limite característico da exponencial

$$\lim_{a\to\infty}\left[1 + \frac{x}{a}\right]^a = e^x$$

$$\Rightarrow \quad D_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iJ_z\phi}{\hbar}\right)$$

gerador infinitesimal corresponde aos primeiros termos da serie de Taylor

Como fora mencionado antes; para que se trate de uma rotação no Esp. de Hilbert pedimos que $D(R)$ Satisfaça as mesmas propriedades que seu análogo clássico $R \in SO(3)$.

(i) Identidade $D(R) \cdot \mathbb{1} = \mathbb{1} \cdot D(R) = D(R)$

(ii) Fechamento $D(R_1) D(R_2) = D(R_3)$

(iii) Inversa $D(R) D^{-1}(R) = \mathbb{1} = D^{-1}(R) D(R)$

(iv) Associativo $D(R_1)[D(R_2) D(R_3)] = [D(R_1) D(R_2)] D(R_3) = D(R_1) D(R_2) D(R_3)$

Para as relações de comutação em particular do operador de momento angular as <u>relações de comutação fundamentais</u>:

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} J_k}$$

símbolo de levi-civita

São análogas as relações de comutação de rotações clássicas.

1. J_k gera rotações em torno do k-ésimo eixo
2. Rotações em torno de eixos diferentes não comutam

→ Spin 1/2 e matrizes de Pauli (ver notas)

Autovetores e Autovalores do Momento Angular

Busca dos autovetores/autovalores de $\vec{J}^2$ e J_z

$$\vec{J}^2 = J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z$$

Perceba que $\underline{[\vec{J}^2, J_k] = 0}$ $(k = 1,2,3)$; de fato tomamos $k=3$ por ex

$$[\vec{J}^2, J_z] = [J_x J_x, J_z] + [J_y J_y, J_z] + \cancel{[J_z J_z, J_z]}^{\,0}$$

$$= J_x \underbrace{[J_x, J_z]}_{\underbrace{i\hbar \epsilon_{132} J_2}_{-i\hbar J_y}} + \underbrace{[J_x, J_z]}_{\underbrace{i\hbar \epsilon_{132} J_2}_{-i\hbar J_y}} J_x + \underbrace{[J_y, J_z]}_{\underbrace{i\hbar \epsilon_{231} J_1}_{i\hbar J_x}} J_y + J_y \underbrace{[J_y, J_z]}_{\underbrace{i\hbar \epsilon_{231} J_1}_{i\hbar J_x}}$$

$$= \cancel{J_x(-i\hbar J_y)} + \cancel{(-i\hbar J_y) J_x} + \cancel{(i\hbar J_x) J_y} + \cancel{J_y (i\hbar J_x)}$$

$$= \underline{0}$$

o mesmo irá acontecer c/ $k=1$, $K=2$; devido a $\epsilon_{ijk} J_k$

Ou seja como $[\vec{J}^2, J_k] = 0$; $\vec{J}^2$ e J_k são possíveis de diagonalizar simultaneamente. Em especial é escolhido J_z. Encontrando os autovetores simultâneos de $\vec{J}^2$ e J_z temos:

$$\begin{cases} \vec{J}^2 |a,b\rangle = a\,|a,b\rangle \\ J_z |a,b\rangle = b\,|a,b\rangle \end{cases}$$

Para este problema nos utilizaremos de uma abordagem muito parecida com a abordagem utilizada para o oscilador harmônico. Iremos trabalhar com os seguintes operadores:

$$\underline{J_\pm = J_x \pm i J_y}$$

<u>não é hermitiano</u>

<u>Operadores de</u>
<u>Escada</u>

Perceba que: $[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = [J_x, J_x - iJ_y] + [iJ_y, J_x - iJ_y]$

$$\Rightarrow \cancelto{0}{[J_x, J_x]} - i\underbrace{[J_x, J_y]}_{-i\hbar J_z} + i\left(\underbrace{[J_y, J_x]}_{i\hbar J_z} + \cancelto{0}{[J_y, -iJ_y]}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{[J_+, J_-] = 2\hbar J_z}$$

além disso:

$$[J_z, J_\pm] = [J_z, J_x \pm iJ_y] = \underbrace{[J_z, J_x]}_{i\hbar\epsilon_{312}J_2} \pm i\underbrace{[J_z, J_y]}_{i\hbar\epsilon_{321}J_1}$$

$$= i\hbar J_y \pm \hbar J_x \Rightarrow \pm\hbar(\underbrace{J_x \pm iJ_y}_{J_\pm})$$

$$\Rightarrow \boxed{[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm}$$

e além disso é fácil de observar pelas relações de comutação de $\vec{J}^2$ que:

$$\boxed{[\vec{J}^2, J_\pm] = 0}$$

Vamos analizar a ação de J_z em $J_\pm|a,b\rangle$

$$J_z J_\pm|a,b\rangle \; ; \; [J_z, J_\pm] = J_z J_\pm - J_\pm J_z \Rightarrow J_z J_\pm = [\;] + J_\pm J_z$$

$$\Rightarrow J_z J_\pm |ab\rangle = \left([J_z, J_\pm] + J_\pm J_z\right)|ab\rangle$$

$$= \underbrace{[J_z, J_\pm]}_{\pm\hbar J_\pm}|ab\rangle + J_\pm \underbrace{J_z |ab\rangle}_{b|ab\rangle}$$

$$\Rightarrow J_z J_\pm |ab\rangle = (b \pm \hbar) J_\pm |ab\rangle$$

Disso temos que $J_\pm|ab\rangle$ é autovetor de J_z com autovalor $b \pm \hbar$.

Em outras palavras atuar com $J_\pm$ em um autoestado de J_z nos retorna o autoestado com o autovalor de J_z adicionado/subtraído de $\hbar$ daí que vem o nome de operador escada. Muito similarmente aos operadores $a, a^\dagger$ que adicionavam ou removiam um quanta de energia.

No entanto, o mesmo não acontece com $\vec{J}^2$:

$$\vec{J}^2 J_\pm |ab\rangle = J_\pm \underbrace{\vec{J}^2 |ab\rangle}_{a|ab\rangle} \quad ; \text{ tendo em vista que } [\vec{J}^2, J_\pm] = 0$$

$$\rightarrow \vec{J}^2 J_\pm |ab\rangle = a J_\pm |ab\rangle$$

Autovetores com autovalor a

Logo $J_\pm|ab\rangle$ são autovetores simultâneos de $\vec{J}^2$ e J_z com autovalores a e $b \pm \hbar$.

Podemos ainda escrever:

$$\underline{J_\pm |ab\rangle = C_\pm |a, b \pm \hbar\rangle}$$

onde $C_\pm$ é determinado via normalização.

Note que: $\vec{J}^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+)$

tirando o valor esperado:

$$\underbrace{\langle ab | \vec{J}^2 - J_z^2 | ab \rangle = \frac{1}{2} \underbrace{\langle ab | J_+ J_+^\dagger | ab \rangle}_{|J_+^\dagger |ab\rangle|^2} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle ab | J_+^\dagger J_+ | ab \rangle}_{|J_+ |ab\rangle|^2}}_{\geq 0}$$

Autovalores são limitados tanto inferiormente quanto superiormente (vai levar eventualmente a quantização do momento angular)

$$\Rightarrow \quad \langle ab | \vec{J}^2 - J_z^2 | ab \rangle \geq 0 \Rightarrow \underline{a \geq b^2}$$

Com isso não é possível ficar acrescentando $\hbar$ ao autovalor de J_z infinitamente, existe um máximo. Em outras palavras $\exists\, b_{max}$ tal que:

$$J_+ |ab_{max}\rangle = 0 \Rightarrow J_- J_+ |ab_{max}\rangle = 0$$ mas temos que:

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i\underbrace{(J_y J_x - J_x J_y)}_{[J_y, J_x]}$$

$$= J_x^2 + J_y^2 - i[J_y, J_x] \Rightarrow \underline{J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z}$$ que pode ser reescrito de uma forma conveniente como: $\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$

$$\Rightarrow \quad (\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|ab\rangle = 0 \Rightarrow a - b_{max}^2 - b_{max}\hbar = 0$$

$$\Rightarrow \underline{a = b_{max}(b_{max} + \hbar)}$$

De maneira análoga, deve existir um b_{min} tal que $J_-|a b_{min}\rangle = 0$

$\Rightarrow J_+J_-|a b_{min}\rangle = 0 \rightarrow J_+J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z$

$\Rightarrow (\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|a b_{min}\rangle = 0 \Rightarrow a^2 - b_{min}^2 + \hbar b_{min} = 0$

$\Rightarrow \boxed{a = b_{min}(b_{min} - \hbar)}$

Comparando os dois resultados; $\underline{b_{max} = -b_{min}}$

passando para escalas mais naturais da mecânica quântica

É possível alcançar b_{max} por um número $\underline{n}$ de aplicações:

daqui que vai sair a quantização do momento angular

$b_{max} = b_{min} + n\hbar \rightarrow \boxed{b_{max} = \frac{n\hbar}{2}}$ def $\boxed{j = \frac{b_{max}}{\hbar}}$

$\Rightarrow \boxed{j = \frac{n}{2}}$ Agora o valor máximo do autovalor de J_z é $j\hbar$

inteiro ou semi-inteiro

O Autovalor de $\vec{J}^2$ será: $\underline{a = \hbar^2 j(j+1)}$ e vamos definir $\boxed{b \equiv m\hbar}$

Se j for inteiro $\rightarrow$ m é inteiro.

Para um dado j os possíveis valores de m são: $m = \underbrace{-j, -j+1, \dots, j-1, j}_{2j+1 \text{ estados}}$

$|a,b\rangle \longrightarrow |j,m\rangle$; nessa nova representação as equações dos autovetores se tornam:

mais especificamente fizemos duas mudanças de variável; $a \rightarrow j$; $b \rightarrow m$: lembrando que:
$a = j(j+1)\hbar$ e $b = \hbar m$

$$\begin{cases} \vec{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar\,|j,m\rangle \\ J_z|j,m\rangle = m\hbar\,|j,m\rangle \end{cases}$$

Os elementos de matriz dos operadores $\vec{J}^2, J_z$ na base dos autovetores simultâneos $|j,m\rangle$ será diagonal com os respectivos autovalores nas diagonais principais; ou seja:

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

$$\langle j',m'|J_z|j,m\rangle = m\hbar\,\delta_{jj'}\,\delta_{mm'}$$

Afim de obter os elementos de $J_\pm$ note primeiramente que:

$$\langle j,m|\underbrace{J_+^\dagger J_+}_{J_- J_+}|j,m\rangle = \langle j,m|(\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j,m\rangle$$

$$\Rightarrow \langle j,m|J_+^\dagger J_+|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$; já vimos que $J_+|j,m\rangle$ deve ser igual a menos de uma constante a $|j,m+1\rangle$ $\longrightarrow$ Em termos de $\underline{a,b}$ J_+ adiciona $\hbar$ ao autovalor; em termos de j,m como fora reescalonado; J_+ adiciona $+1$ ao autovalor.

$$J_+|j,m\rangle = C_{jm}^+|j,m+1\rangle$$ Com isso temos que (análogo ao operador escada do oscilador harmônico)

$$\langle j,m|J_+^\dagger J_+|j,m\rangle = \underbrace{(\langle j,m|J_+^\dagger)}_{\langle j,m+1|(C_{jm}^+)^*}\underbrace{(J_+|j,m\rangle)}_{C_{jm}^+|j,m+1\rangle} = |C_{jm}^+|^2 \underbrace{\langle j,m+1|j,m+1\rangle}_{\substack{=1 \\ \text{por normalização}}}$$

$\Rightarrow$ juntando as duas expressões obtidas: $|C^+_{jm}|^2 = \hbar^2 j(j+1) - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$

simplificando: $\underbrace{|C^+_{jm}|^2 = \hbar^2 (j-m)(j+m+1)}$ Escolhendo C^+_{jm} como real e positivo e realizando o mesmo procedimento para J_- temos finalmente:

$$\boxed{\begin{aligned} J_+|j,m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\hbar\,|j,m+1\rangle \\ J_-|j,m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\hbar\,|j,m-1\rangle \end{aligned}}$$

Assim se realizarmos $\langle j',m'|J_\pm|j,m\rangle$ teremos os coeficientes dos operadores $J_\pm$ na base $|j,m\rangle$:

$$\langle j',m'|J_\pm|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar\,|j,m\pm1\rangle\,\delta_{jj'}\,\delta_{m',m\pm1}$$

<u>Mas e os operadores de rotação?</u>

Bom, dada uma rotação clássica $R \in SO(3)$ a associamos um operador no espaço de Hilbert $D(R)$, que possui a forma: $D(R) = \exp\left(-\frac{i\vec{J}\cdot\hat{n}\phi}{\hbar}\right)$

Na base do momento angular $|j,m\rangle$ temos que seus coeficientes são dados por:

$$\langle j,m'|\exp\left(\frac{-i\vec{J}\cdot\hat{n}\phi}{\hbar}\right)|j,m\rangle = D^j_{m'm}(R)$$ Funções de Wigner

Note que os j não interferem nos coeficientes devido ao fato que $D(R)|j,m\rangle$ ser autovetor de $\vec{J}^2$ com o mesmo autovalor $\hbar^2 j(j+1)$; <u>pq?</u>

<u>resp:</u> $\vec{J}^2 D(R)|j,m\rangle = D(R)\vec{J}^2|j,m\rangle \rightarrow$ pois $D(R)$ é função de J_k

e $\vec{J}^2$ comuta com J_k ; ie: $[\vec{J}^2, J_k] = 0 \Rightarrow [\vec{J}^2, f(J_k)] = 0$

Continuando temos:

$$\vec{J}^2 D(R)|j,m\rangle = D(R)\vec{J}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) D(R)|j,m\rangle \Rightarrow$$ $D(R)|j,m\rangle$ é autovetor de $\vec{J}^2$

Com isso, temos que se realizarmos uma rotação em nosso sistema, não podemos alterar o valor de j pois se não alterariamos também os autovalores que são invariantes sobre rotação pois trata-se de escalares. Essa "possível mudança" no j "ocorre" pois $[\vec{J}^2, D(R)] = 0$

Diferentemente em geral $[J_z, D(R)] \neq 0$ logo pode haver uma mudança no valor de m.

Matriz $(2j+1)\times(2j+1)$ de coeficientes $D^j_{m'm}(R)$ $\equiv$ Representação Irredutível $(2j+1)$ dimensional do Operador $D(R)$

Com uma escolha adequada de bases $D(R)$ pode ser escrita numa forma Bloco-diagonal onde cada bloco representa uma matriz quadrada $(2j+1)\times(2j+1)$; $[D^{(j)}_{m'm}]$ com um valor definido de j

$$\begin{bmatrix} \blacksquare & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \blacksquare & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \blacksquare & 0 \\ & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$\rightarrow$ O conjunto de todas matrizes de rotação $D(R)$ para um determinado j formam um grupo

Identidade $\rightarrow \phi = 0$

Inversa $\rightarrow \phi = -\phi$ (sobre mesmo eixo $\hat{n}$)

Fechado $\rightarrow \sum_{m'} D^{(j)}_{m''m'}(R_1)\, D^{(j)}_{m'm}(R_2) = D^{(j)}_{m''m}(R_3)$

unitário $\rightarrow D_{m'm}(R^{-1}) = D^{*}_{mm'}(R)$

$$|j,m\rangle \rightarrow D(R)|j,m\rangle$$

expandindo temos:

$$D(R)|j,m\rangle = \sum_{m'} |j,m'\rangle\langle j,m'|D(R)|j,m\rangle$$

expandido apenas em m' uma vez que os estados j permanecem inalterados.

$$= \sum_{m'} |j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(R)$$

$$\Rightarrow D(R)|j,m\rangle = \sum_{m'} D^{(j)}_{m'm}(R)\,|j,m'\rangle$$

Se por exemplo tivermos um operador de rotação definido pelos ângulos de Euler α,β,γ:

Para um j arbitrário teremos:

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)|j,m\rangle$$

$$= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}\langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle$$

não trivial pois mistura valores de m

definimos então: $$\underline{d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j,m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle}$$

Para o caso $j=1/2$ (spin $1/2$) teríamos:

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos\beta/2 & -\sin\beta/2 \\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2 \end{pmatrix}$$

Momento Angular Orbital:

$\hookrightarrow$ momento angular da mecânica quântica definido tal qual seu análogo clássico.

$$\vec{L} = \hat{X} \times \hat{P}$$

$\uparrow$ produto vetorial dos operadores.

Por conseguinte; o momento angular orbital faz sentido apenas em espaços tridimensionais

Ele se iguala ao momento angular $\vec{J}$ quando o spin da partícula é nulo ou desprezível.

Note que o mesmo satisfaz as relações de comutação do momento angular:

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

$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$; em seguida temos:

$$1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xP_y - yP_x)$$

Agir sobre um estado de posição $|x, y, z\rangle$

$$\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x, y, z\rangle = \left[1 - i\left(\frac{P_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x') + i\left(\frac{P_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right]|x'y'z'\rangle$$

$\hookrightarrow$ translações infinitesimais de $\vec{p}$

$$= \underbrace{|x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle}_{\text{Rotação infinitesimal em torno do eixo } Z}$$

$\Rightarrow$ $\vec{L}$ pode ser ainda visto como gerador infinitesimal das rotações

A rotação torna-se mais aparente se tratarmos num sistema de coordenadas esféricos:

$$\langle x', y', z' | \alpha \rangle \longrightarrow \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

Então uma função de onda perante a rotação fica:

$$\langle r, \theta, \varphi | \left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right] | \alpha \rangle = \langle r, \theta, \varphi - \delta\varphi | \alpha \rangle = \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

que leva a identificação:

$$\langle \vec{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

Para L_x e L_y temos: (em esféricas)

$$\langle \vec{x}' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

$$\langle \vec{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

Podemos então construir os operadores de escada:

$$\langle \vec{x}' | L_\pm | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

e o operador $\vec{L}^2$: $\vec{L}^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+)$

$$\langle \vec{x}' | \vec{L}^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

parte radial do Laplaciano a menos de $\frac{1}{r^2}$

No entanto, lembre que:

$$\hat{L}^2 = \hat{x}^2\hat{p}^2 - (x\cdot p)^2 + i\hbar\, x\cdot p$$

$$\langle \vec{x}'|\vec{x}\cdot\vec{p}|\alpha\rangle = \vec{x}'\cdot(-i\hbar\nabla'\langle\vec{x}'|\alpha\rangle) = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}'|\alpha\rangle$$

E também:

$$\langle \vec{x}'|(x\cdot p)^2|\alpha\rangle = -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}|\alpha\rangle\right) = -\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle\vec{x}|\alpha\rangle + r\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}'|\alpha\rangle\right)$$

$\Rightarrow$ rescrevendo $\langle\vec{x}'|\hat{L}^2|\alpha\rangle = r^2\langle\vec{x}'|p^2|\alpha\rangle + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle\vec{x}'|\alpha\rangle + 2r\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}|\alpha\rangle\right)$

Em termos do operador de energia cinética $\hat{p}^2/2m$:

$$\frac{1}{2m}\langle\vec{x}'|\hat{p}^2|\alpha\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\vec{\nabla}'^2\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle\vec{x}|\alpha\rangle + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}'|\alpha\rangle}_{\text{parte radial do laplaciano}} - \underbrace{\frac{1}{\hbar^2 r^2}\langle\vec{x}'|\hat{L}^2|\alpha\rangle}_{\text{parte angular do laplaciano}}\right)$$

Ou seja a menos do potencial $V(r)$ conseguimos descrever o hamiltoneano em específico sua parte radial; utilizando o operador de momento angular orbital. Em especial; se o potencial for esfericamente simetrico (e o spin nulo) a equação de onda de Schröedinger é separável em parte radial e angular. As auto-funções da energia se escrevem então como:

$$\langle\vec{x}|n\,l\,m\rangle = R_{nl}(r)\,\underbrace{Y_l^m(\theta,\varphi)}$$

$\longrightarrow$ Harmônicos Esféricos; sempre a mesma solução p/ potenciais esfericamente simetricos

Obviamente, a forma de $R_{nl}(r)$ varia com o potencial submetido ao sistema. Quando há simetria esférica no Hamiltoneano, ele comutara com $\vec{L}^2$ e L_z e portanto os autovetores de energia também serão autovetores de $\vec{L}^2$ e L_z mas dadas as relações de comutação do momento angular; os autovalores de $\vec{L}^2$ e L_z serão $l(l+1)\hbar^2$ e $m\hbar$

Podemos considerar também: $\langle \hat{n} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{n})$

autovetor de direção

$Y_l^m \rightarrow$ amplitude de um estado $|l,m\rangle$ ser encontrado na direção $|\hat{n}\rangle$

Para o caso deste momento angular orbital, temos que $\underline{l}$ não pode ser um número semi-inteiro pois assim $\underline{m}$ seria semi inteiro, o que daria um sinal negativo a função de onda, sujeita a uma rotação de 2π. Fazendo assim com que a função de onda não seja unívoca.

$\hookrightarrow$ Outra explicação mais matemática vem do Teorema de Sturm-Liouville na qual as soluções da EDP dos harmônicos esféricos formam um conjunto completo p/ l inteiro. Fazendo com que uma função arbitraria de θ, ϕ possa ser expandida em termos dos diversos Y_l^m apenas com valores inteiros de l e m.

Potenciais Centrais

Hamiltoneanos na forma: $H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(r)$; $r^2 = \vec{X}^2$

são esfericamente simétricos; classicamente temos a conservação do momento angular, quanticamente isso também ocorre uma vez que: $[\vec{L}, \vec{X}^2] = [\vec{L}, \hat{P}^2] = 0$

Teorema de Ehrenfest sobre a evolução temporal de operadores

$\Rightarrow [\vec{L}, H] = 0 = [\vec{L}^2, H] \rightarrow \vec{L}$ é uma constante de movimento

Logo: procuramos um autoestado de energia que satisfaz: $|\alpha\rangle = |Elm\rangle$

$$\begin{cases} H|Elm\rangle = E|Elm\rangle \\ \vec{L}^2|Elm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|Elm\rangle \\ L_z|Elm\rangle = \hbar m|Elm\rangle \end{cases}$$

É mais fácil trabalhar na base das posições $|\vec{x}\rangle$ com coordenadas esféricas. Sabemos que devido as simetrias; a parte angular se reduz aos harmônicos esféricos. Chegamos então à equação radial:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)}_{\substack{\text{potencial efetivo} \\ V_{eff}(r)}}\right]R_{El}(r) = E\,R_{El}(r)$$

Uma comum substituição é $R_{El}(r) = \dfrac{u_{El}(r)}{r}$ assim o problema se transforma em achar a função de onda unidimensional de uma partícula sujeita a um potencial efetivo $V_{eff}(r)$.

Ainda é possível fazer uma mudança de variável e analisar comportamentos assintóticos (ver átomo de hidrogênio) nos restando então:

$$u_{El}(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}\,v(\rho) \qquad \text{onde} \quad \rho \equiv kr, \quad k^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$$

onde a função $v(\rho)$ satisfaz a EDO:

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{dv}{d\rho} + \left[\frac{V}{E} - \frac{2(l+1)}{\rho}\right]v = 0$$

Adição de Momento Angular:

Quanticamente funciona de uma maneira muito diferente do que se comparada a mecânica clássica ao passo que de uma forma muito similar. Isso ocorre pois um sistema de N-partículas possuem representações muito distintas se comparadas com Mecânica Classica (Ver sistemas de mais de uma partícula e partículas identicas).

Para um sistema de duas partículas (é analogo a N partículas) temos que o espaço do sistema é nada mais que o produto direto (tensorial) dos diferentes espaços de Hilbert de cada partícula:

$$H_1 \otimes H_2 = H$$

Logo o momento angular total do sistema é: $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{J}_2$

Onde $\vec{J}_1$ é o operador de momento angular referente ao espaço da partícula 1 e o análogo para $\vec{J}_2$. Vale lembrar que em cada espaço são satisfeitas as relações de comutação do momento angular: $[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{1k}$; $[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{2k}$ e que operadores de espaços distintos comutam entre si: $[J_{1i}, J_{2j}] = 0$.

A rotação infinitesimal total do sistema pode ser escrita como: $1 - \frac{i}{\hbar} \underbrace{(\vec{J}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{J}_2)}_{\vec{J}} \cdot \hat{n}\delta\phi$

E para ângulos finitos temos:

$$D_1(R) \otimes D_2(R) = \exp\left(\frac{-i \vec{J}_1 \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i \vec{J}_2 \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right)$$

Além disso temos também que o momento angular total $\vec{J}$ possui as mesmas propriedades que o operador de momento angular, ou seja:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

A questão principal gira em torno de qual representação (base) utilizar e como se dá essa mudança de base. Os coeficientes dessa mudança de base são conhecidos como coeficientes de Clebsch-Gordon; as duas representações possíveis são:

(1) Autovetores simultâneos de $\vec{J}_1^{\,2}, \vec{J}_2^{\,2}, J_{1z}, J_{2z} \longrightarrow |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$

em uma notação totalmente aberta seria: $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ e eles são definidos por:

$$\begin{cases} \vec{J}_1^{\,2} |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \\ \vec{J}_2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \\ J_{1z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_1 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \\ J_{2z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_2 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \end{cases}$$

(2) Autovetores simultâneos de $\vec{J}^{\,2}, \vec{J}_1^{\,2}, \vec{J}_2^{\,2}, J_z \longrightarrow |j_1, j_2; jm\rangle$

Note primeiro que todos operadores comutam e que $[\vec{J}^{\,2}, J_1^2] = 0$

Com isso reescrevemos $\vec{J}^{\,2} = J_1^2 + J_2^2 + 2 J_{1z} J_{2z} + J_{1+} J_{2-} + J_{1-} J_{2+}$

Os autovetores são definidos por:

$$\begin{cases} \vec{J}_1^{\,2} |j_1, j_2; jm\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1, j_2; jm\rangle \\ \vec{J}_2^{\,2} |j_1, j_2; jm\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1, j_2; jm\rangle \\ \vec{J}^{\,2} |j_1, j_2; jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j_1, j_2; jm\rangle \\ J_z |j_1, j_2; jm\rangle = m\hbar |j_1, j_2; jm\rangle \end{cases}$$

Muitas vezes nessa base j_1 e j_2 são subentendidos: $\underline{|j_1 j_2; jm\rangle \rightarrow |j, m\rangle}$

Note também que: $[\vec{J}^2, J_z] = 0$; $[\vec{J}^2, J_{1z}] \neq 0$ e $[\vec{J}^2, J_{2z}] = 0$

As duas bases são conectadas por uma transformação unitária:

coeficientes de Clebsch Gordon

$$\underbrace{|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle}$$

Lembre que pela relação de completude: $\sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1$

Note que: $(J_z - J_{1z} - J_{2z})|j_1 j_2; jm\rangle = 0$ aplicando $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ a esquerda

$$\Rightarrow \quad (m - m_1 - m_2)\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle = 0 \Rightarrow \underline{m = m_1 + m_2}$$

p/ coef não nulos

$\underline{\text{nota}}$: os coeficientes são nulos a menos que: $\underline{|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2}$

$$\Downarrow$$

$$\dim\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\} = \dim\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$$

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

$\underline{\text{Coef de Clebsch-Gordon: } \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle}$

Todos os coeficientes formam uma matriz unitária de transformação; disso decorrem certas propriedades de ortogonalidade.

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$$

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Os coeficientes também podem ser escritos em termos dos <u>símbolos 3-j de Wigner</u>

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

Se fixarmos j_1, j_2 e j teremos que os diferentes valores de m_1, m_2 obedecem a uma relação de recursão:

$$J_\pm | j_1, j_2; jm \rangle = (j_{1\pm} + j_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$$

Aplicando $j_{1\pm}$ e $j_{2\pm}$ temos:

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\, | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle$$

$$= \sum_{m_1'} \sum_{m_2'} \Big(\sqrt{(j_1 \mp m_1')(j_1 \pm m_1' + 1)}\, | j_1 j_2; m_1' \pm 1, m_2' \rangle$$

$$+ \sqrt{(j_2 \mp m_2')(j_2 \pm m_2' + 1)}\, | j_1 j_2; m_1', m_2' \pm 1 \rangle \Big)$$

$$\times \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm \rangle$$

$\xrightarrow{\times \langle j_1 j_2; m_1 m_2 |}$ $m_1 = m_1' \pm 1$, $m_2 = m_2'$ p/ primeiro termo

$m_1 = m_1'$; $m_2 = m_2' + 1$ p/ segundo termo

Assim obtemos as recursões:

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)}\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle$$

$$\|$$

$$\sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)}\langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2; j m\rangle + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)}\langle j_1 j_2 m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j m\rangle$$

agora a condição para que os coeficientes não sejam nulos se tornou

$$m_1 + m_2 = m \pm 1$$

Dada as relações de recursão os coeficientes podem ser obtidos analisando o plano (m_1, m_2) e tendo um coeficiente inicial.