Propriedades gerais de momento angular na mecânica quântica

- **Realidade experimental:** *o momento magnético de átomos, medido em qualquer direção, é quantizado. Isso significa que o momento angular, que é proporcional ao momento magnético, também é quantizado. A realidade experimental mostra que as diferenças entre valores possíveis de momento angular (orbital, spin ou de um modo geral da composição orbital+spin), em qualquer direção, são múltiplos de* $\hbar$.
  - Neste capítulo desenvolveremos o formalismo quântico do momento angular que descreve essa realidade experimental.
  - O formalismo vai contextualizar e mostrar a relevância do momento angular na descrição de espectros atômicos, moleculares e nucleares; vai permitir uma visão mais completa sobre spin; e vai criar condições para estudar propriedades magnéticas (efeito Zeeman entre elas).
- Começaremos com momento angular na mecânica clássica ($\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p}$).

  Sabemos que $\dfrac{d\vec{\mathcal{L}}}{dt} = \vec{\tau}$ (torque externo) e que na ausência de forças externas

  $\dfrac{d\vec{\mathcal{L}}}{dt} = 0 \rightarrow \vec{\mathcal{L}}$ é dita uma constante de movimento (não muda com o tempo).
  - Isso também vale para forças centrais $\underbrace{\vec{F} \parallel \vec{r},}$ pois nesse caso $\vec{\tau} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$.

  Nestas condições o movimento fica restrito ao plano definido por $\vec{p}$ e $\vec{F}$.

Do momento angular clássico para o quântico

- Como ficam essas propriedades na Mecânica Quântica? (Chamo a atenção que restringir o movimento da partícula à um plano parece violar a relação de incerteza na direção $\perp$ ao plano).

- Podemos a partir da quantidade física clássica, obter a observável quântica, isto é $\vec{\mathcal{L}}(\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y, \mathcal{L}_z) \to \vec{L}(L_x, L_y, L_z)$ (operador da mecânica quântica).

- O passo seguinte é tentar responder: $\begin{cases} \text{(1) Por que o espectro de } L_i \text{ é discreto?} \\ \text{(2) Quanto vale } [L_i, L_j]\text{? Consequências?} \\ \text{(3) Em que situação } [H, L_j] = 0\text{?} \\ \text{(4) E o spin (sem análogo clássico)?} \end{cases}$

- Usaremos a seguinte nomenclatura $\begin{cases} \text{momento angular orbital} \to \vec{L} \\ \text{momento angular intrínseco} \to \vec{S} \\ \text{momento angular total} \to \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \end{cases}$

- Algumas vezes, para facilitar, usaremos $\vec{J}$ com caráter geral: pode ser $\vec{S}, \vec{L}$ ou a soma de $\vec{S}'s,$ ou a soma de $\vec{L}'s$ ou de $\vec{S}'s,$ e $\vec{L}'s.$

Relações de comutação características de momento angular

- Momento angular orbital $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ e as consequências de $[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

  As componentes misturam componentes de $\vec{R}$ e de $\vec{P}$, que nem sempre comutam entre si. Será que precisamos simetrizar para obter operadores Hermiteanos?

- ○ De fato, não é preciso simetrizar, pois as componentes de $\vec{x}$ e $\vec{p}$ que compõem

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{pmatrix} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x),$$

  estão em dimensões distintas, e o δ_{ij} presente no comutador é sempre zero.

  $\therefore\ (YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z, XP_y - YP_x)^\dagger = (YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z, XP_y - YP_x),$

  uma vez que $(YP_z - ZP_y)^\dagger = P_zY - P_yZ = YP_z - ZP_y,$ etc.

  Assim temos que $\vec{L} = \vec{L}^\dagger$ é um operador Hermiteano (não exige simetrização).

- E as componentes, comutam entre si? Para verificar isso calcule

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] = [YP_z, ZP_x] - \underbrace{[YP_z, XP_z]}_{0} - \underbrace{[ZP_y, ZP_x]}_{0} + [ZP_y, XP_z],$$

  tal que $[L_x, L_y] = Y \underbrace{[P_z, Z]}_{-i\hbar} P_x + X \underbrace{[Z, P_z]}_{+i\hbar} P_y = i\hbar(XP_y - YP_x) = i\hbar L_z$

  De forma semelhante, mostre que $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$ e $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$.

Generalização para um sistema de partículas

- Considere o momento angular total (escrito no referencial $\mathcal{O}$) de um sistema de N partículas, dado na mecânica clássica por $\vec{\mathcal{L}} = \sum_i^N \vec{\mathcal{L}}_i$. Não é difícil mostrar que se tomarmos que a contribuição de cada partícula é $\vec{L}_i = \vec{R}_i \times \vec{P}_i$, vai valer $[L_x, L_y] = i\hbar L_z ...$, se considerarmos que $[L_{ix}, L_{jy}] = i\hbar L_{iz}\delta_{ij} ...$
- Assim escreveremos, de forma geral, que as componentes de momento angular satisfazem as regras de comutação: $\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases} \Rightarrow [J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$

onde $\begin{cases} \epsilon_{ijk} = 0 \rightarrow \text{dois ou mais índices iguais,} \\ \epsilon_{ijk} = 1 \rightarrow \text{rotações cíclicas de } \epsilon_{123}, \\ \epsilon_{ijk} = -1 \rightarrow \forall \text{ trocas não cíclicas de } \epsilon_{123}. \end{cases}$

- As componentes de $\vec{J}$ não comutam entre si.
- A boa notícia é que $J^2 = \vec{J}\cdot\vec{J} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ comuta com todas as componentes, pois o que vale para $[J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] = [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] = J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y +$ $+ J_z[J_z, J_x] + [J_z, J_x]J_z = -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y + i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z = 0$, vale também para as outras componentes, isto é: $[J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0$.

Relações de comutação das componentes de momento angular

- O que significam essas relações de não comutação? (1) $J_x,\ J_y$ e J_z não podem ser medidos simultaneamente, (2) a medida de um "estraga" a medida do outro e (3) complicam de certa forma a previsão do futuro das medidas de observáveis deste tipo.
- Entretanto, o fato de todas as componentes de $\vec{J}$ comutarem com J^2, permite escolher uma delas e formar um par de observáveis que comutam. Se tal par comutar com a Hamiltoniana, talvez seja possível formar um CCOC e explorar situações onde o momento angular total e uma de suas projeções sejam bons números quânticos. Veremos em que circunstâncias isso é possível.
- No caso de uma partícula sujeita uma força central, veremos que H, L^2 e L_z respeitam as relações $\begin{cases}[H, L^2] = 0\\ [H, L_z] = 0\\ [L^2, L_z] = 0\end{cases}$ e podem formar um CCOC, assim como H, L^2 e L_x ou H, L^2 e L_y. Todos juntos, entretanto, não formam um CCOC, uma vez que $[L_i, L_j] = i\hbar L_k \epsilon_{ijk}$. De um modo geral, elegemos L_z como a componente de $\vec{L}$ de nosso CCOC. Antes de prosseguir nesse assunto, veremos que as relações de comutação das componentes de momento angular, por si só, definem o espectro de L^2 e L_z, conforme a realidade experimental.

Relações de comutação e o espectro de momento angular

Teoria geral de momento angular

- Definições e notações.
  - Definiremos dois novos operadores, J_+ e J_- por: $\begin{cases} J_+ \equiv J_x + iJ_y \\ J_- \equiv J_x - iJ_y \end{cases}$
  - Note que não são operadores Hermiteanos, pois $J_+^\dagger = J_-$ e $J_-^\dagger = J_+$.
  - Daqui para frente trabalharemos com $\{J^2, J_z, J_+, J_-\}$ no lugar de $\{J^2, J_z, J_x, J_y\}$.
  - Note que $[J^2, J_z] = [J^2, J_+] = [J^2, J_-] = 0$ e que

$$[J_z, J_+] = [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y - i^2\hbar J_x = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+$$

$$[J_z, J_-] = [J_z, J_x - iJ_y] = [J_z, J_x] - i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i^2\hbar J_x = -\hbar(J_x - iJ_y) = -\hbar J_-$$

$$J_+J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z.$$

$$J_-J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z.$$

  - As duas últimas expressões somadas, fornecem $J^2 = J_z^2 + \dfrac{J_+J_- + J_-J_+}{2}$.

Relações de comutação e o espectro de momento angular

- Notação para os autovalores de J^2 e J_z

○ O que devemos esperar de $\langle\psi|J^2|\psi\rangle$? Sabemos que como $\underbrace{J_i \text{ é Hermiteano,}}$

$$\langle\psi|J^2|\psi\rangle = \langle\psi|J_x^2|\psi\rangle + \langle\psi|J_y^2|\psi\rangle + \langle\psi|J_z^2|\psi\rangle = \||J_x|\psi\rangle\|^2 + \||J_y|\psi\rangle\|^2 + \||J_z|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

- Por convenção, adotaremos $J^2|\psi\rangle = j(j+1)\hbar^2|\psi\rangle$, com $j \geq 0$ e uso de $\hbar$ (dimensão de momento angular). A forma do autovalor parece inusitada. Se fosse $\lambda\hbar^2$, com a exigência $\lambda \geq 0$, seria natural. Note, entretanto, que a condição $j(j+1) = \lambda$ não é restritiva, pois $j^2 + j - \lambda = 0 \Rightarrow$ com discriminante $\Delta = 1 + 4\lambda$, fornece duas raízes para $\lambda \geq 0$, $j = \dfrac{-1 \pm \sqrt{1+4\lambda}}{2}$ $\begin{cases} \text{uma sempre positiva começando do zero, e} \\ \cancel{\text{outra sempre negativa começando do zero.}} \end{cases}$

- Também, por convenção, adotaremos $J_z|\psi\rangle = m\hbar|\psi\rangle$ e para $|\psi\rangle$, o autoket de J^2 e J_z, usaremos a notação $|\psi\rangle = |k, j, m\rangle$, onde k representa tudo que falta para $\{J^2, J_z\}$ formar um CCOC.

Sobre os autovalores de $\mathbf{J^2} \rightarrow \mathbf{j(j+1)}\hbar^2$, com $\mathbf{j} \geq \mathbf{0}$ e de $\mathbf{J_z} \rightarrow \mathbf{m}\hbar$.

- *Lema 1:* $-j \leq m \leq j$

○ Para provar, considere que $\|J_+|\psi\rangle\|^2 = \langle k, j, m|J_-J_+|k, j, m\rangle \geq 0$ e $\therefore$

$$\langle k, j, m|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \geq 0$$

$$\hbar^2\big(j(j+1) - m(m+1)\big) = \hbar^2(j-m)(j+m+1) \geq 0 \text{ (caso 1)}$$

Relações de comutação e o espectro de momento angular

- Poderíamos ter começado por $\|J_-|\psi\rangle\|^2 = \langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle \geq 0$ e $\therefore$

$$\langle k,j,m|(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \geq 0$$

$$\hbar^2\big(j(j+1) + m(-m+1)\big) = \hbar^2(j+m)(j-m+1) \geq 0 \text{ (caso 2)}$$

- Precisamos conciliar $\begin{cases} \text{caso 1: } (j-m)(j+m+1) \geq 0 \\ \text{caso 2: } (j+m)(j-m+1) \geq 0 \end{cases}$

- **caso 1** $\begin{cases} j-m \geq 0 \text{ e } (j+m+1) \geq 0 \begin{cases} m \leq j \\ m \geq -j-1 \end{cases} \Rightarrow -(j+1) \leq m \leq j \\ j-m \leq 0 \text{ e } (j+m+1) \leq 0 \begin{cases} m \geq j \\ m \leq -j-1 \end{cases} \Rightarrow \overbrace{j \leq m \leq -(j+1)}^{\text{impossível, pois } j \geq 0} \end{cases}$

- **caso 2** $\begin{cases} j+m \geq 0 \text{ e } (j-m+1) \geq 0 \begin{cases} m \geq -j \\ m \leq j+1 \end{cases} \Rightarrow -j \leq m \leq (j+1) \\ j+m \leq 0 \text{ e } (j-m+1) \leq 0 \begin{cases} m \leq -j \\ m \geq j+1 \end{cases} \Rightarrow \overbrace{m \leq -j \text{ e } m > j}^{\text{impossível, pois } j \geq 0} \end{cases}$

Para satisfazer $\begin{cases} -(j+1) \leq m \leq j \\ -j \leq m \leq (j+1) \end{cases} \Rightarrow$ precisamos $-j \leq m \leq j$

Teoria geral de momento angular

- *Lema 2:*

(i) Se $m=-j \Rightarrow J_-|k,j,m\rangle = 0$.

(ii) Se $m>-j \Rightarrow J_-|k,j,m\rangle \neq 0$ onde $J_-|k,j,m\rangle \begin{cases} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m-1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{cases}$

- Demonstração de (i): a norma de um ket é positiva ou zero. Vamos começar pela norma de $J_-|k,j,m\rangle$, onde $\| J_-|k,j,m\rangle \|^2 = \langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle \geq 0$. Como $J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$, podemos escrever $\big(j(j+1)-m^2+m\big)\hbar^2 \geq 0$, o que permite escrever $(j+m)(j-m+1) \geq 0$. Em que condições que isso é zero? $\begin{cases} j+m=0 \rightarrow m=-j \text{ (se a norma é zero é porque o ket é nulo.)} \\ j-m+1=0 \rightarrow m=j+1 \text{ (impossível, pois } m \text{ está entre } -j \text{ e } j.) \end{cases}$

Isso permite concluir que $J_-|k,j,-j\rangle = 0$, pois $\| J_-|k,j,-j\rangle \|^2 = 0$.

É possível mostrar o caminho inverso. Se $\begin{cases} |k,j,m\rangle \neq 0 \text{ e} \\ J_-|k,j,m\rangle = 0 \end{cases} \Rightarrow m=-j.$

Aplique J_+ em $J_-|k,j,m\rangle = 0$ e use que $J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ para obter $(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|k,j,m\rangle = \underbrace{\big((j(j+1)-m^2+m\big)}_{(j+m)(j-m+1)}\hbar^2|k,j,m\rangle = 0$ e como $|k,j,m\rangle \neq 0$ temos que $m=j+1 \rightarrow$ impossível ou $m=-j \rightarrow$ c.q.d.

Teoria geral de momento angular

(ii) Se $m > -j \Rightarrow J_-|k,j,m\rangle \neq 0$ onde $J_-|k,j,m\rangle$ $\begin{cases} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m-1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{cases}$

- Demonstração da parte 1: se $m > -j \Rightarrow \| J_-|k,j,m\rangle \|^2 = \underbrace{(j+m)(j-m+1)}_{\text{só é zero, se } m=-j} > 0$

Se a norma é diferente de zero, então o vetor é não nulo. Parte 1 demonstrada.

- Para demonstrar a parte 2, considere $[J^2, J_-]|k,j,m\rangle = 0$, pois $[J^2, J_-] = 0$.

Isso implica em $J^2 J_-|k,j,m\rangle = J_- J^2|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_-|k,j,m\rangle$, ou seja

$$\boxed{J_-|k,j,m\rangle \textit{ é autoket de } J^2 \textit{ com autovalor } j(j+1)\hbar^2.}$$

Em seguida considere que $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$ e aplique em $|k,j,m\rangle$ para obter:

$J_z J_-|k,j,m\rangle = J_- J_z|k,j,m\rangle - \hbar J_-|k,j,m\rangle = (m-1)\hbar J_-|k,j,m\rangle$, ou seja

$$\boxed{J_-|k,j,m\rangle \textit{ é autoket de } J_z \textit{ com autovalor } (m-1)\hbar.}$$

Teoria geral de momento angular

- *Lema 3:*

(i) Se $m = j \Rightarrow J_+|k,j,m\rangle = 0.$

(ii) Se $m < j \Rightarrow J_+|k,j,m\rangle \neq 0$ onde $J_+|k,j,m\rangle \begin{cases} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m+1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{cases}$

- Demonstração de (i): a norma de um ket é positiva ou zero. Vamos começar pela norma de $J_+|k,j,m\rangle$, onde $\| J_+|k,j,m\rangle \|^2 = \langle k,j,m|J_-J_+|k,j,m\rangle \geq 0.$ Como $J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$, podemos escrever $\big(j(j+1) - m^2 - m\big)\hbar^2 \geq 0$, o que permite escrever $(j-m)(j+m+1) \geq 0$. Em que condições que isso é zero? $\begin{cases} j - m = 0 \rightarrow m = j \text{ (se a norma é zero é porque o ket é nulo.)} \\ j + m + 1 = 0 \rightarrow m = -j-1 \text{ (impossível, pois } m \text{ está entre } -j \text{ e } j.) \end{cases}$

Isso permite concluir que $J_+|k,j,+j\rangle = 0$, pois $\| J_+|k,j,+j\rangle \|^2 = 0.$

É possível mostrar o caminho inverso. Se $\begin{cases} |k,j,m\rangle \neq 0 \text{ e} \\ J_+|k,j,m\rangle = 0 \end{cases} \Rightarrow m = +j.$

Aplique J_- em $J_+|k,j,m\rangle = 0$ e use que $J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ para obter $(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|k,j,m\rangle = \underbrace{\big(j(j+1) - m^2 - m\big)}_{(j-m)(j+m+1)}\hbar^2|k,j,m\rangle = 0$ e como $|k,j,m\rangle \neq 0$ temos que $m = -j-1 \rightarrow$ impossível ou $m = +j \rightarrow$ c.q.d.

Teoria geral de momento angular

(ii) Se $m < j \Rightarrow J_+|k,j,m\rangle \neq 0$ onde $J_+|k,j,m\rangle$ $\begin{cases} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m+1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{cases}$

- Demonstração da parte 1: se $m < j \Rightarrow \| J_+|k,j,m\rangle \|^2 = \underbrace{(j-m)(j+m+1)}_{\text{só é zero, se } m=+j} > 0$

Se a norma é diferente de zero, então o vetor é não nulo. Parte 1 demonstrada.

- Para demonstrar a parte 2, considere $[J^2, J_+]|k,j,m\rangle = 0$, pois $[J^2, J_+] = 0$.

Isso implica em $J^2 J_+|k,j,m\rangle = J_+ J^2|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_+|k,j,m\rangle$, ou seja

$$\boxed{J_+|k,j,m\rangle \textit{ é autoket de } J^2 \textit{ com autovalor } j(j+1)\hbar^2.}$$

Em seguida considere que $[J_z, J_+] = \hbar J_+$ e aplique em $|k,j,m\rangle$ para obter:
$J_z J_+|k,j,m\rangle = J_+ J_z|k,j,m\rangle + \hbar J_+|k,j,m\rangle = (m+1)\hbar J_+|k,j,m\rangle$, ou seja

$$\boxed{J_+|k,j,m\rangle \textit{ é autoket de } J_z \textit{ com autovalor } (m+1)\hbar.}$$