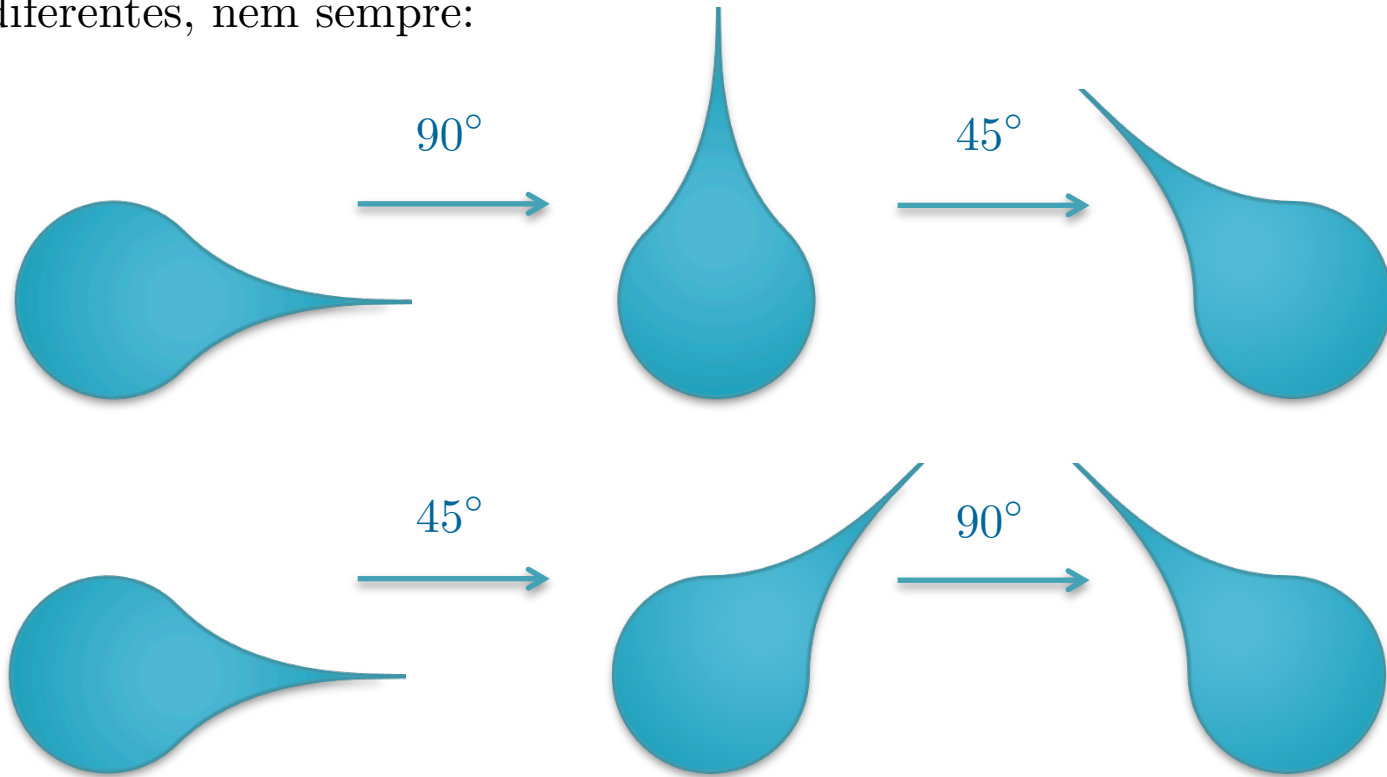


Teoria de Momento Angular

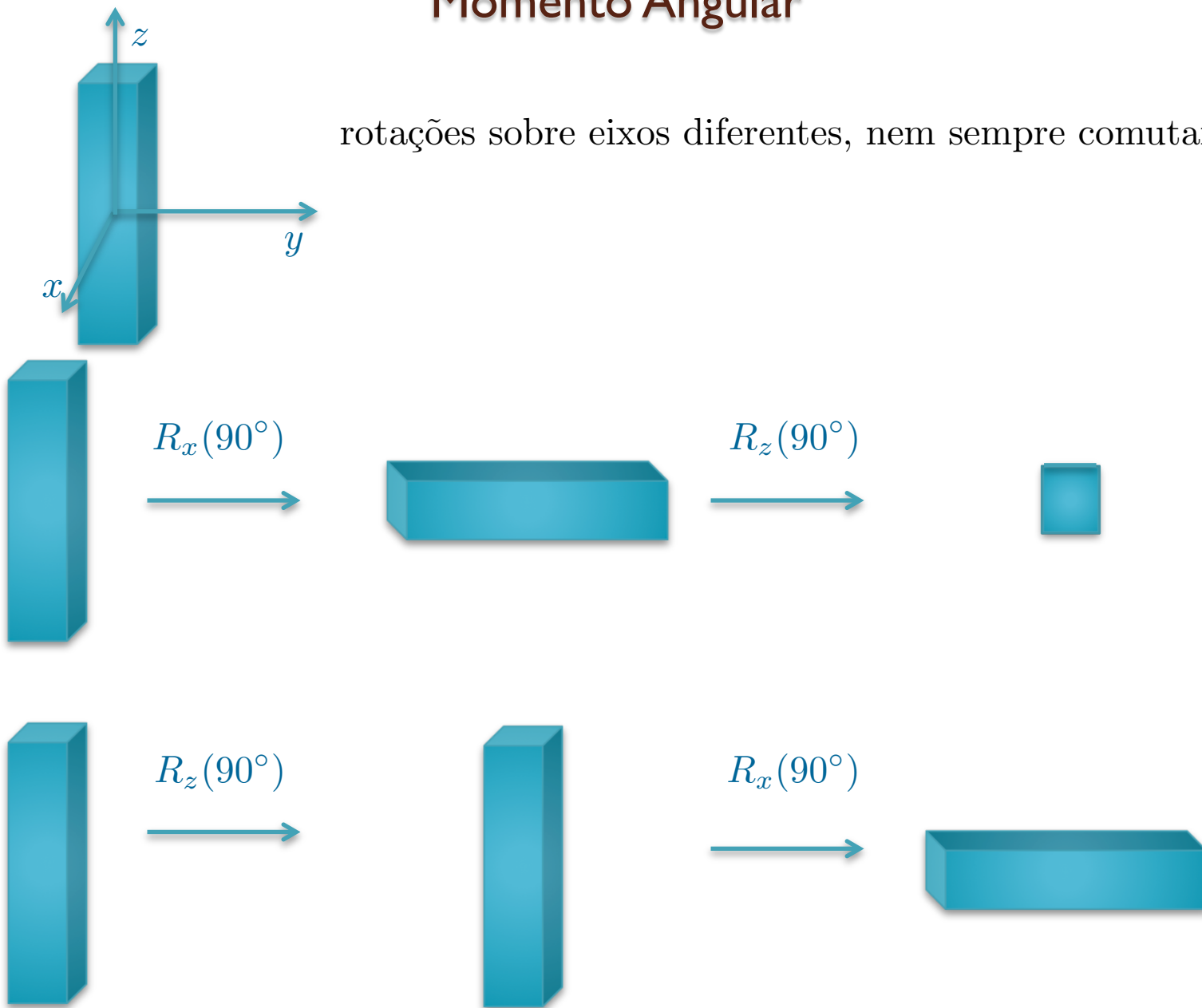
Motivação: átomos, moléculas, espectroscopia, simetrias, espalhamento, etc.
Um bom começo para este assunto: (1) relacionar rotações com momento angular; e (2) relações de comutação:

Comece observando que rotações sobre o mesmo eixo comutam, sobre eixos diferentes, nem sempre:



Momento Angular

rotações sobre eixos diferentes, nem sempre comutam



Momento Angular

Vamos mostrar isso quantitativamente. Começamos representando rotações por matrizes 3×3 , reais e ortogonais:

Considere um vetor $\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$. Quando rodamos o sistema (para nós, eixos

não rodam) as componentes mudam para: $\mathbf{V}' = \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix}$. As componentes se

relacionam da seguinte forma: $\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$

A norma $(V_x \ V_y \ V_z) \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = |\mathbf{V}|^2$ é conservada, se $R^T R = 1$, ou seja,

se R é ortogonal, temos.

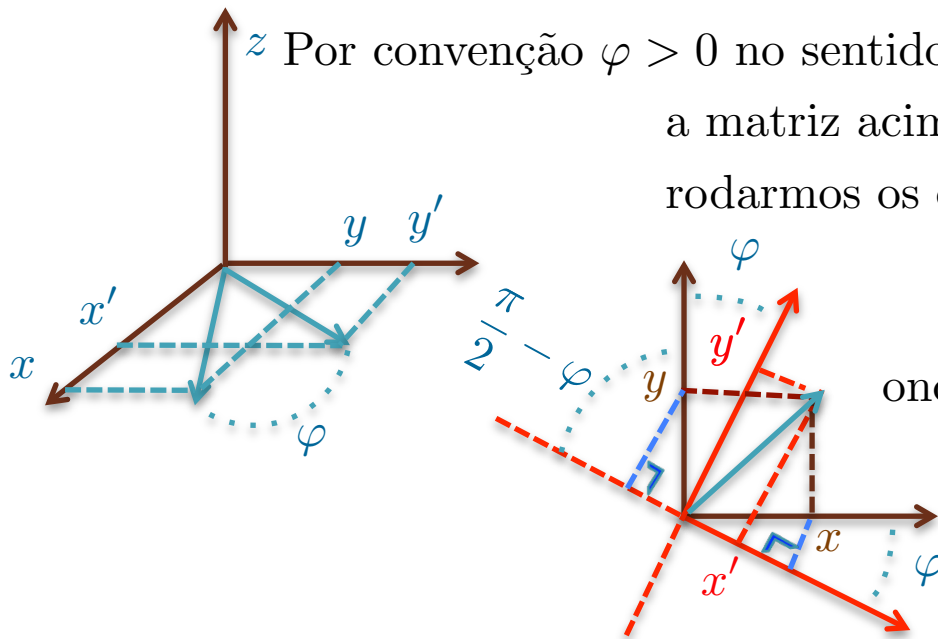
$$(V'_x \ V'_y \ V'_z) \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = |\mathbf{V}'|^2 = (V_x \ V_y \ V_z) R^T R \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = |\mathbf{V}|^2.$$

Momento Angular

Começemos com uma rotação de φ ao redor do eixo z . A matriz que representa esta operação é dada por:

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ o que implica em: } \begin{cases} x' = x \cos \varphi - y \sin \varphi \\ y' = x \sin \varphi + y \cos \varphi \\ z' = z \end{cases}$$

Observe que, por convenção, estamos rodando o vetor (sistema) e não os eixos, mas as convenções estão relacionadas: rodar o sistema mantendo os eixos fixos é equivalente a manter o sistema fixo e rodar os eixos ao contrário.



Por convenção $\varphi > 0$ no sentido anti-horário. Fica mais fácil ver a matriz acima, se mantivermos o vetor fixo e rodarmos os eixos ao contrário.

onde:
$$\begin{cases} x' = x \cos \varphi - y \cos \left(\frac{\pi}{2} - \varphi\right) \\ y' = x \sin \varphi + y \sin \left(\frac{\pi}{2} - \varphi\right) \\ z' = z \end{cases}$$

Momento Angular

Olhando para $R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ podemos obter a matriz que

gera rotações infinitesimais ao redor de z . Basta tomar $\varphi = \epsilon$ pequeno. Isto é:

$$R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \text{ Para obter as matrizes que rodam } \epsilon \text{ sobre os}$$

outros eixos, rode ciclicamente em $x(x')$, $y(y')$ e $z(z')$ a expressão

$$\begin{cases} x' = x(1 - \frac{\epsilon^2}{2}) - y\epsilon \\ y' = x\epsilon + y(1 - \frac{\epsilon^2}{2}) \\ z' = z \end{cases} \text{ por exemplo } \begin{cases} y' = y(1 - \frac{\epsilon^2}{2}) - z\epsilon \\ z' = y\epsilon + z(1 - \frac{\epsilon^2}{2}) \\ x' = x \end{cases} \text{ fornece}$$

$$R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix} \text{ com } \begin{cases} x \rightarrow y; y \rightarrow z; z \rightarrow x \\ x' \rightarrow y'; y' \rightarrow z'; z' \rightarrow x' \\ R_z(\epsilon) \rightarrow R_x(\epsilon) \end{cases}$$

$$\text{De forma similar, obtenha } R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}$$

Algumas observações

Note agora que $R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix}$ e que é diferente de

$R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & \epsilon^2 & \epsilon \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix}$ e que a diferença

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\epsilon^2) - 1 = R_z(\epsilon^2) - R_V(0)$$

onde todos os termos de ordem superior à ϵ^2 foram desprezados. Esta relação será útil para deduzirmos relações de comutação de momento angular em mecânica quântica.

Operador que roda kets

Como caracterizar rotações na Mecânica Quântica? Dado R , matriz 3×3 , associamos a ela $D(R)$, um operador, tal que:

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

A representação matricial de $D(R)$ depende da dimensão do espaço que representa $|\alpha\rangle$.

Por exemplo $\begin{cases} N = 2 \rightarrow \text{spin } \frac{1}{2}, D(R) \rightarrow \text{matriz } 2 \times 2 \\ N = 3 \rightarrow \text{spin } 1, D(R) \rightarrow \text{matriz } 3 \times 3, \text{ etc.} \end{cases}$

Veremos que rotação infinitesimal é uma forma de definir $D(R)$.

Chute $D = U_\epsilon = 1 - iG\epsilon$ com G sendo um operador Hermiteano.

Inspirado em $\begin{cases} G = \frac{p_x}{\hbar} \text{ p/ translação, onde } \epsilon = dx' \\ G = \frac{H}{\hbar} \text{ p/ evolução temporal, onde } \epsilon = dt, \end{cases}$

o que esperar? $G = \frac{J_k}{\hbar}$ p/ rotação ao redor do eixo k , onde $\epsilon = d\varphi$.

Adotaremos a notação mais geral: $D(\hat{n}, d\varphi) = 1 - i\frac{\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}}{\hbar}d\varphi$, onde D é um operador que, com auxílio de \mathbf{J} , roda kets quando o sistema é rodado de $d\varphi$ ao redor de \mathbf{n} . Não definiremos $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$, pois queremos algo mais geral para tratar spin também.

Rotação finita

$$D_z(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - i \frac{J_z}{\hbar} \left(\frac{\varphi}{N} \right) \right]^N = \exp \left(-i \frac{J_z \varphi}{\hbar} \right) = 1 - i \frac{J_z \varphi}{\hbar} - \frac{J_z^2 \varphi^2}{2\hbar^2} + \dots$$

Postulado: $D(R)$ tem o mesmo grupo de propriedades que R .

Ou seja, $\left\{ \begin{array}{l} 1) \text{ Identidade: } R.1 = R \rightarrow D(R).1 = D(R) \\ 2) \text{ Fechamento: } R_1 R_2 = R_3 \rightarrow D(R_1) D(R_2) = D(R_3) \\ 3) \text{ Inversa: } R R^{-1} = R^{-1} R = 1 \rightarrow D^{-1}(R) D(R) = D(R) D^{-1}(R) = 1 \\ 4) \text{ Associativa: } R_1 (R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3 \rightarrow \\ D(R_1) (D(R_2) D(R_3)) = (D(R_1) D(R_2)) D(R_3) = D(R_1) D(R_2) D(R_3) \end{array} \right.$

Como ficaria a propriedade 5) $R_x(\epsilon) R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon) R_x(\epsilon) = R_z(\epsilon^2) - 1$?

$$\begin{aligned} & \left(1 - i \frac{J_x}{\hbar} \epsilon - \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} \right) \left(1 - i \frac{J_y}{\hbar} \epsilon - \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} \right) - \left(1 - i \frac{J_y}{\hbar} \epsilon - \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} \right) \left(1 - i \frac{J_x}{\hbar} \epsilon - \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} \right) = \\ & = 1 - i \frac{J_z}{\hbar} \epsilon^2 - 1 \end{aligned}$$

termos em ordem $\left\{ \begin{array}{l} \epsilon^0 \rightarrow 1 - 1 = 1 - 1 \rightarrow 0 = 0 \\ \epsilon^1 \rightarrow -i \frac{J_y}{\hbar} \epsilon - i \frac{J_x}{\hbar} \epsilon + i \frac{J_x}{\hbar} \epsilon + i \frac{J_y}{\hbar} \epsilon = 0 \rightarrow 0 = 0 \\ \epsilon^2 \rightarrow -\frac{J_x J_y \epsilon^2}{\hbar^2} - \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} - \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} + \frac{J_y J_x \epsilon^2}{\hbar^2} + \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} + \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} = -i \frac{J_z \epsilon^2}{\hbar} \\ \text{ou seja: } J_x J_y - J_y J_x = i\hbar J_z \rightarrow [J_x, J_y] = i\hbar J_z \end{array} \right.$

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

Rotações finitas e algumas propriedades

Em geral, quando geradores de transformações infinitesimais não comutam, o grupo correspondente de operações é dito não abeliano.

$$\text{Assim } \begin{cases} J_x, J_y, \text{ e } J_z \rightarrow \text{ não abeliano} \\ p_x, p_y, \text{ e } p_z \rightarrow \text{ abeliano} \end{cases}$$

Note que para obter as relações de comutação, usamos apenas que:

- 1) J_k é o gerador de rotações sobre o eixo k .
- 2) Rotações sobre eixos diferentes não comutam.

Uma aplicação: Rotações finitas em Sistemas de spin $\frac{1}{2}$

$$\text{Vimos que } [S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \text{ é satisfeito por: } \begin{cases} S_x = \frac{\hbar}{2} \{ |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| \} \\ S_y = \frac{i\hbar}{2} \{ -|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| \} \\ S_z = \frac{\hbar}{2} \{ |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \} \end{cases}$$

Considere uma rotação por um ângulo φ sobre o eixo z , $|\alpha\rangle_R = D_z(\varphi)|\alpha\rangle$,

onde $\begin{cases} |\alpha\rangle \rightarrow \text{ ket de um sistema de spin } \frac{1}{2} \text{ antes de rodá-lo.} \\ |\alpha\rangle_R \rightarrow \text{ ket de um sistema de spin } \frac{1}{2} \text{ depois de rodá-lo.} \end{cases}$

Conforme discutimos, $D_z(\varphi) = \exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right)$. Para ver se funciona, considere seu efeito em $\langle S_x \rangle$.

Rotações finitas em sistemas de spin 1/2

Vejam o que acontece com $\langle S_x \rangle$ quando rodamos o sistema ao redor de z por um ângulo φ , isto é: $\langle S_x \rangle \xrightarrow{\text{roda } |\alpha\rangle} {}_R\langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | D_z^\dagger(\varphi) S_x D_z(\varphi) | \alpha \rangle$.

Para isso, precisamos calcular $\exp\left(\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right)$.

Método 1: direto, usando $S_x = \frac{\hbar}{2} \{ |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \}$

$$\rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right) \exp\left(\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right) \{ |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \} \exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right) \quad \text{usando } S_z|\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$$

$$\rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right) \left\{ \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) |+\rangle\langle -| \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) + \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) |-\rangle\langle +| \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) \right\} =$$

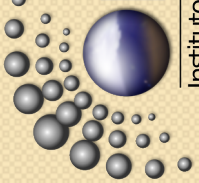
$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right) \left\{ \exp(i\varphi) |+\rangle\langle -| + \exp(-i\varphi) |-\rangle\langle +| \right\} =$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right) \left\{ \{ |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \} \cos \varphi + i \{ |+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +| \} \sin \varphi \right\}$$

$$= S_x \cos \varphi - S_y \sin \varphi$$

Método 2: indireto, usando

$$\exp(iG\lambda) A \exp(-iG\lambda) = A + i\lambda[G, A] + \frac{i^2\lambda^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots + \frac{i^n\lambda^n}{n!} [G, [G, \dots [G, [G, A]] \dots]] \text{ com } G = S_z; A = S_x \text{ e } \lambda = \frac{\varphi}{\hbar}.$$



Assim, temos

$$\begin{aligned}
 \exp\left(\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right)S_x\exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right) &= S_x + i\frac{\varphi}{\hbar}[S_z, S_x] + \frac{i^2\varphi^2}{2!\hbar^2}[S_z, [S_z, S_x]] + \\
 &+ \frac{i^3\varphi^3}{3!\hbar^3}[S_z, [S_z, [S_z, S_x]]] + \dots + \frac{i^n\varphi^n}{n!\hbar^n}[S_z, [S_z, \dots [S_z, [S_z, S_x]]\dots]] = \\
 &= S_x + i\frac{\varphi}{\hbar}i\hbar S_y + \frac{i^2\varphi^2}{2!\hbar^2}[S_z, i\hbar S_y] + \frac{i^3\varphi^3}{3!\hbar^3}[S_z, [S_z, i\hbar S_y]] + \dots = \\
 &= S_x - S_y\varphi + \frac{i^2\varphi^2}{2!\hbar^2}i\hbar(-i\hbar S_x) + \frac{i^3\varphi^3}{3!\hbar^3}i\hbar[S_z, -i\hbar S_x] + \dots = \\
 &= S_x - S_y\varphi - \frac{\varphi^2}{2!}S_x + \frac{i^3\varphi^3}{3!\hbar^3}i\hbar(-i\hbar)(i\hbar)S_y + \dots \\
 &= \left(1 - \frac{\varphi^2}{2!} + \dots\right)S_x - \left(\varphi - \frac{\varphi^3}{3!} + \dots\right)S_y = S_x \cos \varphi - S_y \sin \varphi \text{ (c.q.d.)}
 \end{aligned}$$

Para esse resultado só usamos regras de comutação, \therefore vale $p/j \neq \frac{1}{2}$

Os dois métodos aplicados para o caso de spin $\frac{1}{2}$, fornecem a seguinte relação entre valores médios: $\langle S_x \rangle \rightarrow {}_R\langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \varphi - \langle S_y \rangle \sin \varphi$. De forma semelhante, obteríamos: $\langle S_y \rangle \rightarrow \langle S_y \rangle \cos \varphi + \langle S_x \rangle \sin \varphi$ and $\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle$, ou seja

$\langle \mathbf{S} \rangle$ roda como um vetor do slide 4

\rightarrow (no caso, um vetor rodando φ em volta de z).

Momento Angular

Encontramos
$$\begin{pmatrix} \langle S_x \rangle_R \\ \langle S_y \rangle_R \\ \langle S_z \rangle_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}, \text{ ou seja}$$

$\langle S_k \rangle \rightarrow \sum_{\ell} R_{k\ell} \langle S_{\ell} \rangle$. De fato, como vimos pelo método 2, vale a relação:

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_{\ell} R_{k\ell} \langle J_{\ell} \rangle.$$

Mostraremos, eventualmente, que tais relações valem para qualquer operador escrito como um vetor! Nossa intuição foi bem até agora.

Uma surpresa não intuitiva:

Rode $|\alpha\rangle$ do espaço de spin $\frac{1}{2}$ em volta de z , de $\varphi = 2\pi$. Para fazer isso, escreva $|\alpha\rangle = \mathbb{1}|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle$ e para rodá-lo, multiplicamos

por $D_z(2\pi)$, isto é $\exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle\langle +|\alpha\rangle + e^{+i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle\langle -|\alpha\rangle$.

$\frac{\varphi}{2}$ é a nossa surpresa, pois isso leva à: $|\alpha\rangle_{R_z(2\pi)} = -|\alpha\rangle$! Ou seja, o sistema foi rodado em 360° e o estado não voltou para si mesmo. Será que este sinal $(-)$ é uma observável?

Precessão de Spin: uma nova olhada

A Hamiltoniana é dada por $H = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \omega S_z$, onde $\omega = \frac{|e|B}{m_e c}$.

Com esta Hamiltoniana, o operador evolução temporal é dado por:

$U(t, 0) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(-\frac{iS_z \omega t}{\hbar}\right)$ que nada mais é que um operador de rotação de um ângulo $\varphi = \omega t$ ao redor do eixo z . Ou seja, o operador de evolução temporal causa precessão do spin. Já havíamos

visto que:
$$\begin{cases} \langle S_x \rangle \rightarrow \langle S_x \rangle \cos \varphi - \langle S_y \rangle \sin \varphi \\ \langle S_y \rangle \rightarrow \langle S_y \rangle \cos \varphi + \langle S_x \rangle \sin \varphi \\ \langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle \end{cases}$$
 e agora,

podemos escrever
$$\begin{cases} \langle S_x \rangle(t) = \langle S_x \rangle(0) \cos \omega t - \langle S_y \rangle(0) \sin \omega t \\ \langle S_y \rangle(t) = \langle S_y \rangle(0) \cos \omega t + \langle S_x \rangle(0) \sin \omega t \\ \langle S_z \rangle(t) = \langle S_z \rangle(0) \end{cases}$$

Ou seja a cada $\frac{2\pi}{\omega}$ o valor médio da medida de componente de spin $\langle S_x \rangle(t)$ (ou $\langle S_y \rangle(t)$) volta para a situação original $\langle S_x \rangle(0)$ (ou $\langle S_y \rangle(0)$).

O ket roda com período $\frac{4\pi}{\omega}$ e o valor médio do operador \mathbf{S} precessiona com período $\frac{2\pi}{\omega}$.

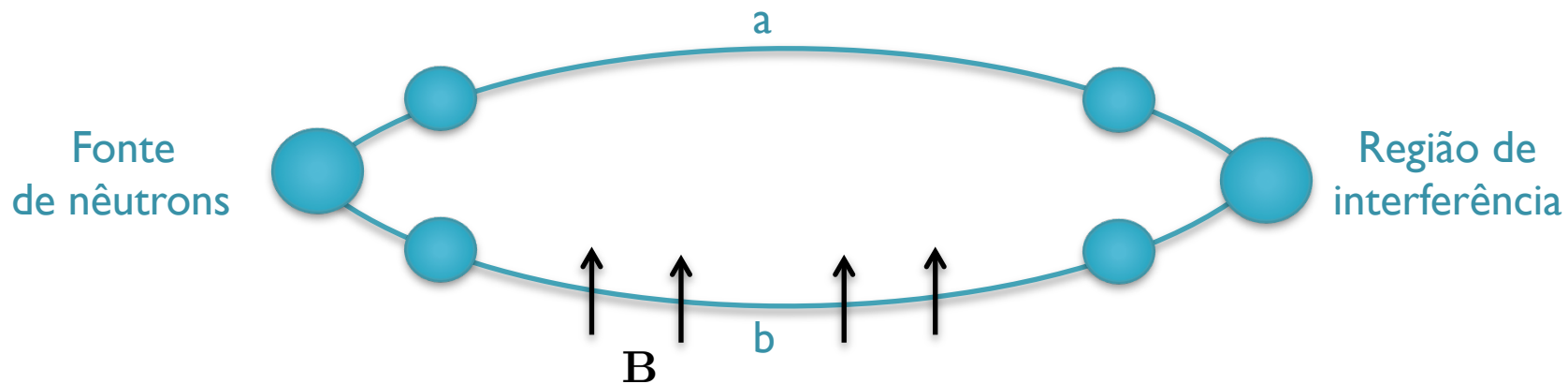
Interferometria de Nêutrons

(mais um experimento de correlação)

Experimento de interferometria de nêutrons para estudar rotações de 2π .

A Hamiltoniana é dada por $H = -\frac{g_n e}{m_n c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \omega S_z$, onde $\omega = \frac{g_n e B}{m_n c}$.

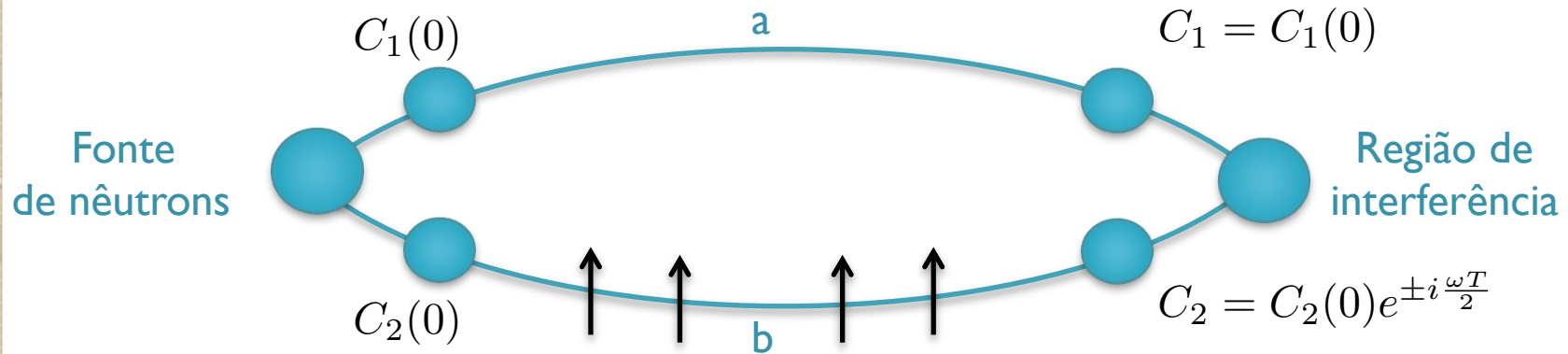
$g_n \approx -1.91$. Considere a figura abaixo. O pacote que representa o neutron é dividido em dois. A parte do pacote que vai pelo caminho b, sente um campo magnético \mathbf{B} constante na direção z . Na região de interferência as partes do pacote se encontram novamente.



Os pedaços de pacotes de onda que vão por b ganham uma fase $e^{\frac{i\omega T}{2}}$, onde o campo \mathbf{B} está presente. T é o intervalo de tempo que a partícula gasta no espaço onde \mathbf{B} existe.

Interferometria de Nêutrons

(mais um experimento de correlação)



$$\therefore \begin{cases} C_1 = \text{amplitude do pacote chegando via caminho } a = C_1(0) \\ C_2 = \text{amplitude do pacote chegando via caminho } b = C_2(0)e^{\pm i\frac{\omega T}{2}} \end{cases}$$

A região de interferência mostra uma intensidade que se comporta como: $\cos\left(\pm \frac{\omega T}{2}\right)$. Quanto vale T ? Se a região onde $\mathbf{B} \neq 0$ for ℓ , temos $T = \frac{\ell}{v}$,

$$\text{com } v = \frac{p}{m_n} = \frac{\hbar k}{m_n} = \frac{\hbar}{\lambda m_n}. \quad \therefore T = \frac{\ell m_n \bar{\lambda}}{\hbar} = \frac{4\pi}{\omega} = \frac{4\pi m_n c}{g_n e B}.$$

O 4π , e não o 2π , é verificado experimentalmente.