F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2021
28/11/2021
Aula 26

Aulas passadas

Definição geral de momento angular: 3 operadores tais que

$$\boxed{\begin{aligned} [J_x, J_y] &= i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y \end{aligned}}$$

Módulo quadrado do momento angular: $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$

$$\left[J^2, J_i\right] = 0$$

Assim, escolheremos J^2 e, por exemplo, J_z , para formar um par de operadores que comutam.

Aulas passadas

Auto-vetores simultâneos de J^2, J_z :

$$J^2 \left|k, j, m\right\rangle = j\left(j+1\right)\hbar^2 \left|k, j, m\right\rangle$$
$$J_z \left|k, j, m\right\rangle = m\hbar \left|k, j, m\right\rangle$$

onde k distingue entre os auto-vetores diferentes com mesmo (j,m).
Os valores possíveis de (j,m) são:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \ldots$$
$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

Para cada j, há $2j+1$ valores possíveis de m.

Aulas passadas

Base padrão: $[k = 1, 2, \ldots, g(j)]$ $\langle k', j', m' | k, j, m \rangle = \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}$

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

Ação universal dos operadores **J** na base padrão:

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

$$J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle$$

$$J_+ |k, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar |k, j, m\rangle + 1$$

$$J_- |k, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar |k, j, m\rangle - 1 \rangle$$

J_x , J_y

Aulas passadas

Momento angular orbital: **L = R x P**

Operadores **L** na representação de posição (em coordenadas esféricas):

(r, θ, ϕ)

$$L_x = i\hbar\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

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

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

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

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

Aula passada

Auto-funções simultâneas de L^2 e L_z:

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi\left(r,\theta,\phi\right)=l\left(l+1\right)\psi\left(r,\theta,\phi\right)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}\psi\left(r,\theta,\phi\right)=m\psi\left(r,\theta,\phi\right)$$

m e l só pode m assumir valores inteiros.

$$\psi\left(r,\theta,\phi\right)=R_{kl}\left(r\right)Y_{lm}\left(\theta,\phi\right)$$

$$Y_{ll}\left(\theta,\phi\right)=\frac{\left(-1\right)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\left(\sin\theta\right)^l e^{il\phi}$$

$$Y_{lm}\left(\theta,\phi\right)=\left[\frac{L_-}{\hbar\sqrt{l\left(l+1\right)-m\left(m-1\right)}}\right]^{(l-m)}Y_{ll}\left(\theta,\phi\right)$$

HARMÔNICOS ESFÉRICOS

Aula passada

Ortonormalização: $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)\, Y_{lm}(\theta,\phi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$

Expansão de funções de (θ,ϕ): $f(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{l,m} Y_{lm}(\theta,\phi)$

$$c_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)\, f(\theta,\phi)$$

Fechamento: $\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\theta',\phi')\, Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\,\delta(\phi-\phi')$

Complexo conjugado: $Y^*_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_{l,-m}(\theta,\phi)$

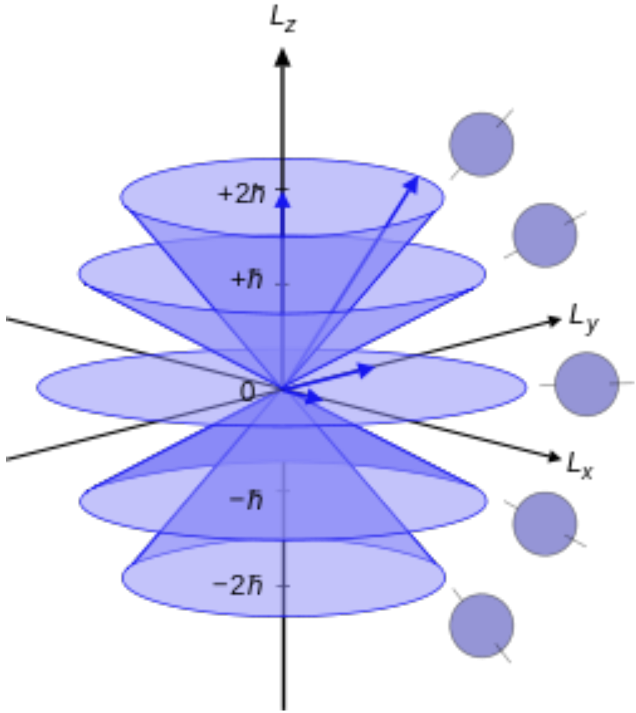
Inversão espacial: **r→-r** $Y_{l,m}(\pi-\theta,\phi+\pi) = (-1)^l Y_{l,m}(\theta,\phi)$

Aula passada

Valores esperados: $|k, l, m\rangle$

$$\langle L_x \rangle = 0$$
$$\langle L_y \rangle = 0$$
$$\langle L_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[l\left(l+1\right) - m^2\right]$$
$$\langle L_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[l\left(l+1\right) - m^2\right]$$
$$\Delta L_x = \sqrt{l\left(l+1\right) - m^2}\,\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$
$$\Delta L_y = \sqrt{l\left(l+1\right) - m^2}\,\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

l=2, m=-2, -1, 0, +1, +2



MÓDULO: $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$

COMPONENTE z: $m\hbar$

Probabilidades de medidas de L^2 e L_z

Suponha dada uma função de estado: $\psi(r, \theta, \phi)$

PARA ISSO, É INTERESSANTE OLHAR PARA BASE PADRÃO,
$|k, l, m\rangle$, CUJA FUNÇÃO DE ONDA PODE SER ESCRITA COMO:

$$\langle r, \theta, \phi | k, l, m\rangle = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

SEM ESPECIFICAR A PARTE RADIAL.

VAMOS ASSUMIR A ORTONORMALIZAÇÃO SEPARADA

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

$$\int_0^{\infty} r^2 dr\, R^*_{k'l}(r) R_{kl}(r) = \delta_{k,k'}$$

NOTEM QUE TEMOS O MESMO $\underline{l}$ NA ÚLTIMA
EXPRESSÃO

ASSIM, PODEMOS EXPANDIR QUALQUER ESTADO:

$$|\psi\rangle = \sum_{k,\ell,m} c_{k,\ell,m} |k,\ell,m\rangle \quad ; \quad \sum_{k,\ell,m} |c_{k\ell m}|^2 = 1$$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{k=1}^{g(\ell)}$$

NA REPRESENTAÇÃO DE POSIÇÃO:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{k,\ell,m} c_{k\ell m} R_{k\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

ONDE:

$$c_{k\ell m} = \langle k\ell m|\psi\rangle$$

$$= \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \, R^*_{k\ell}(r) Y^*_{\ell m}(\theta,\phi) \psi(r,\theta,\phi)$$

Probabilidades de medidas de L^2 e L_z

Método 1: Supondo que temos uma base $R_{kl}(r)$.

DADO $|\psi\rangle = \sum_{klm} c_{klm} |klm\rangle$

DO POSTULADO 4:

$$P_{L^2, L_z}(l, m) = \sum_{k=1}^{g(l)} |\langle klm|\psi\rangle|^2 = \sum_{k=1}^{g(l)} |c_{klm}|^2$$

ADICIONALMENTE, SE MEDIRMOS APENAS L^2:

$$P_{L^2}(l) = \sum_{k=1}^{g(l)} \sum_{m=-l}^{+l} |c_{klm}|^2$$

FINALMENTE, SE MEDIRMOS APENAS L_z:

$$P_{L_z}(m) = \sum_{l \geq |m|} \sum_{k=1}^{g(l)} |c_{klm}|^2$$

ONDE A RESTRIÇÃO ($l \geq |m|$) É NECESSÁRIA PORQUE $|m| \leq l$

Método 2: Sem a suposição de que temos uma base $R_{kl}(r)$, podemos expandir apenas a parte angular, já que o momento angular só age nos ângulos.

PODEMOS EXPANDIR:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} a_{lm}(r) Y_{lm}(\theta,\phi)$$

ONDE:

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

MAS, DE:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{k,l,m} c_{klm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi)$$

FICA CLARO QUE:

$$a_{lm}(r) = \sum_{k=1}^{g(l)} c_{klm} R_{kl}(r)$$

E

$$c_{klm} = \int_0^{\infty} r^2 dr \, R^*_{kl}(r) \, a_{lm}(r)$$

(COMPARE COM A EXPRESSÃO ANTERIOR DO c_{klm})

MAS:

$$\int_0^\infty r^2 dr \, \underbrace{|a_{\ell m}(r)|^2}_{a^*_{\ell m}(r)\, a_{\ell m}(r)} = \int_0^\infty r^2 dr \sum_{k'=1}^{g(\ell)} C^*_{k'\ell m} R^*_{k'\ell}(r) \sum_{k=1}^{g(\ell)} C_{k\ell m} R_{k\ell}(r)$$

$$= \sum_{k,k'} C^*_{k'\ell m} C_{k\ell m} \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr \, R^*_{k'\ell}(r) R_{k\ell}(r)}_{\delta_{k,k'} \text{ (VER LÁ ATRÁS)}}$$

$$= \sum_k |C_{k\ell m}|^2 = P_{L^2, L_z}(\ell, m)$$

$$\Rightarrow P_{L^2, L_z}(\ell, m) = \int_0^\infty r^2 dr \, |a_{\ell m}(r)|^2$$

QUE NÃO DEPENDE DE TERMOS UMA BASE RADIAL.

SE MEDIRMOS APENAS L^2:

$$P_{L^2}(\ell) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int_0^\infty r^2 dr \, |a_{\ell m}(r)|^2$$

SE MEDIRMOS APENAS L_z:

$$P_{L_z}(m) = \sum_{\ell \geq |m|} \int_0^\infty r^2 dr \, |a_{\ell m}(r)|^2$$

Método 3 (medida apenas de L_z): expandindo apenas em ϕ

NESSE CASO, ESCREVEMOS OS HARMÔNICOS ESFÉRICOS:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = Z_{lm}(\theta)\,\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

DE TAL FORMA QUE:

$$\int_0^{2\pi} d\phi\, \frac{e^{-im'\phi}}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} = \delta_{m,m'}$$

$$\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Z^*_{l'm}(\theta)\, Z_{lm}(\theta) = \delta_{l,l'}$$

ASSIM: $\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m(r,\theta)\,\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$

ONDE: $b_m(r,\theta) = \int_0^{2\pi} d\phi\, \frac{e^{-im\phi}}{\sqrt{2\pi}}\,\psi(r,\theta,\phi)$

DA EXPRESSÃO DE $C_{k\ell m}$:

$$C_{k\ell m} = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, R^*_{k\ell}(r) Y^*_{\ell m}(\theta,\phi) \psi(r,\theta,\phi)$$

E DE $Y_{\ell m}(\theta,\phi) = Z_{\ell m}(\theta) \dfrac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$

E DE:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{k,\ell,m} C_{k\ell m} R_{k\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$b_m(r,\theta) = \sum_{k,\ell \geq |m|} C_{k\ell m} R_{k\ell}(r) Z_{\ell m}(\theta) = \sum_{\ell \geq m} a_{\ell m}(r) Z_{\ell m}(\theta)$$

CONSIDERE AGORA A INTEGRAL:

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, \underbrace{|b_m(r,\theta)|^2}_{b^*_m(r,\theta) b_m(r,\theta)} = \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \sum_{\ell' \geq |m|} a^*_{\ell' m}(r) Z^*_{\ell' m}(\theta) \sum_{\ell \geq |m|} a_{\ell m}(r) Z_{\ell m}(\theta)$$

$$= \sum_{\ell,\ell'} a^*_{\ell' m}(r) a_{\ell m}(r) \delta_{\ell,\ell'} = \sum_{\ell} |a_{\ell m}(r)|^2$$

FINALMENTE:

$$P_{L_z}(m) = \sum_{l \geq |m|} \int_0^\infty r^2 dr \, |a_{lm}(r)|^2$$

$$P_{L_z}(m) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, |b_m(r,\theta)|^2$$

QUE NÃO DEPENDE NEM DE $R_{kl}(r)$ NEM DE $Z_{lm}(\theta)$.

Exemplos

A) $\psi(r,\theta,\phi) = f(r)\, g(\theta,\phi)$

VAMOS SUPOR, SEM PERDA DE GENERALIDADE, QUE

$$\int_0^\infty r^2 dr\, |f(r)|^2 = 1 \qquad \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, |g(\theta,\phi)|^2 = 1$$

QUERO AS VÁRIAS PROBABILIDADES DE MEDIDAS DE L^2, L_z.

MÉTODO 2: $\quad g(\theta,\phi) = \sum_{\ell,m} d_{\ell,m} Y_{\ell m}(\theta,\phi)$

ONDE: $\quad d_{\ell,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)\, g(\theta,\phi)$

$$\Rightarrow \psi(r,\theta,\phi) = \sum_{\ell,m} \underbrace{\left[d_{\ell,m} f(r)\right]}_{a_{\ell m}(r)} Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

PORTANTO:

$$P_{L^2, L_z}(\ell, m) = \int_0^\infty r^2 dr\, |a_{\ell m}(r)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr\, |d_{\ell,m}|^2\, |f(r)|^2$$

$$= |d_{\ell,m}|^2 \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr\, |f(r)|^2}_{1} = |d_{\ell,m}|^2$$

NOTEM QUE O RESULTADO FINAL <u>NÃO</u> DEPENDE DE $f(r)$.

AS OUTRAS PROBABILIDADES DECORREM DA PRIMEIRA:

$$P_{L^2}(\ell) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} |d_{\ell,m}|^2$$

$$P_{L_z}(m) = \sum_{\ell \geq |m|} |d_{\ell,m}|^2$$

(B) $\psi(r,\theta,\phi) = f(r)\,h(\theta)\,k(\phi)$

SUPONDO: $\displaystyle\int_0^\infty r^2 dr\,|f(r)|^2 = \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, |h(\theta)|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi\, |k(\phi)|^2 = 1$

ESSE É UM CASO ESPECIAL DO EXEMPLO (A).

$$d_{\ell,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\; Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)\, h(\theta)\, k(\phi)$$

MAS, SE QUISERMOS MEDIR APENAS L_z, PODEMOS USAR O MÉTODO $\underline{3}$: $\displaystyle k(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$ ONDE:

$$c_m = \int_0^{2\pi} d\phi\, \frac{e^{-im\phi}}{\sqrt{2\pi}}\, k(\phi)$$

$$\Rightarrow \psi(r,\theta,\phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left[c_m f(r)\, h(\theta)\right]}_{b_m(r,\theta)} \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

PORTANTO:

$$P_{L_z}(m) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, |b_m(r,\theta)|^2$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, |c_m|^2 \, |f(r)|^2 \, |h(\theta)|^2$$

$$P_{L_z}(m) = |c_m|^2$$

A PROBABILIDADE NÃO DEPENDE DE $f(r)$ E $h(\theta)$.

COMO APLICAÇÃO DESSES RESULTADOS, SUPONHA O CASO

$$h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad k(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi\, |k(\phi)|^2 = 1 \quad \text{E} \quad \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, |h(\theta)|^2 = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta = 1$$

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{f(r)}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow g(\theta,\phi) = h(\theta)\, k(\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$d_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y^*_{lm}(\theta,\phi) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

MAS: $Y_{0,0}(\theta,\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow d_{l,m} = \displaystyle\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y^*_{lm}(\theta,\phi) Y_{0,0}(\theta,\phi)$

DE:
$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)\, Y_{lm}(\theta,\phi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$$

$\Rightarrow d_{l,m} = \delta_{l,0}\,\delta_{m,0} \Rightarrow$ MEDIDAS DE L^2 E L_z SÓ PODEM DAR $l=0$ E $m=0$ COMO RESULTADO COM PROBABILIDADE $\underline{1}$.

OUTRO EXEMPLO: $h(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos\theta$ $\quad k(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

PODE-SE MOSTRAR QUE AMBAS ESTÃO NORMALIZADAS.

$$g(\theta,\phi) = h(\theta)\, k(\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = Y_{1,0}(\theta,\phi)$$

POR INSPEÇÃO.

$$\Rightarrow d_{l,m} = \delta_{l,1}\, \delta_{m,0}$$

$\Rightarrow$ SÓ PODE-SE OBTER $l=1$ E $m=0$ EM MEDIDAS DE L^2, L_z

ÚLTIMO EXEMPLO: $h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ $\quad k(\phi) = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2\pi}}$

É ÓBVIO QUE $k(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$ $\quad c_m = \delta_{m,1}$

$\Rightarrow$ MEDIDAS DE L_z DARÃO, COM PROBABILIDADE 1

$m = 1$.

MAS E MEDIDAS DE L^2 ?

$$g(\theta,\phi) = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{4\pi}} = \sum_{l,m} d_{l,m} Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$d_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \, Y^*_{lm}(\theta,\phi) \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{4\pi}}$$

$$= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \, Z^*_{lm}(\theta) \frac{e^{-im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{4\pi}} =$$

$$= \delta_{m,1} \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, \frac{Z^*_{\ell m}(\theta)}{\sqrt{2}}}$$

↳ PODE SER CALCULADA A PARTIR DAS EXPRESSÕES DE: $Z_{\ell m}(\theta)$

$$Z_{\ell m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \, P_{\ell m}(\cos\theta)$$

ONDE $P_{\ell m}(x)$ SÃO AS CHAMADAS FUNÇÕES ASSOCIADAS DE LEGENDRE.

COM ISSO, PODE-SE MOSTRAR QUE A INTEGRAL EM $\underline{\theta}$ É NÃO NULA PARA TODO $\underline{\ell}$ ÍMPAR E É ZERO SE $\underline{\ell}$ É PAR.

PORTANTO, MEDIDAS DE L^2 PODEM RESULTAR EM QUALQUER VALOR ÍMPAR DE $\underline{\ell}$ COM PROBABILIDADES QUE PODEM SER CALCULADAS A PARTIR DAS INTEGRAIS ACIMA.