F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
23/11/2022
Aula 23

Aula passada

Momento angular orbital:

$$L_x = YP_z - ZP_y$$
$$L_y = ZP_x - XP_z$$
$$L_z = XP_y - YP_x$$

Regras de comutação:

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

Definição geral de momento angular: 3 operadores tais que

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

Aula passada

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

$$[J^2, J_i] = 0$$

$$J_x^2 + J_y^2 = J^2 - J_z^2$$

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

Operadores "escada": $$J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

$$(J_\pm)^\dagger = J_\mp$$

$$J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$J_+ J_- = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$$

Regras de comutação dos operadores "escada": $$[J_z, J_+] = \hbar J_+$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_-$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

$$[J^2, J_\pm] = 0$$

Aula passada

Os auto-valores de J^2 são não negativos:

$$J^2 |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle \Rightarrow \lambda \geq 0$$

DEFINIMOS:

$$J^2 |\psi_\lambda\rangle = \lambda \hbar^2 |\psi_\lambda\rangle$$

λ É ADIMENSIONAL

REDEFINIMOS λ EM TERMOS DE j:

$$\lambda = j(j+1) \text{ E } j \geq 0$$

ESCREVENDO j EM TERMOS DE λ: $j^2 + j - \lambda = 0$

$$j = \begin{cases} \cancel{\dfrac{-1 - \sqrt{1 + 4\lambda^2}}{2}} < 0 \\ \dfrac{\sqrt{1 + 4\lambda^2} - 1}{2} \geq 0 \; \checkmark \end{cases}$$

HÁ UMA RELAÇÃO UM-PARA-UM ENTRE λ E j.

$$\Rightarrow \boxed{J^2 |\psi_\lambda\rangle = j(j+1)\hbar^2 |\psi_\lambda\rangle} \qquad j \geq 0$$

Os auto-vetores simultâneos de J^2 e J_z

$$J^2|\psi_\lambda\rangle = j(j+1)\hbar^2|\psi_\lambda\rangle$$

JUNTANDO J_z, ESTAMOS PROCURANDO OS AUTO-VETORES E AUTO-VALORES COMUNS DE J^2 E J_z, TAIS QUE:

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

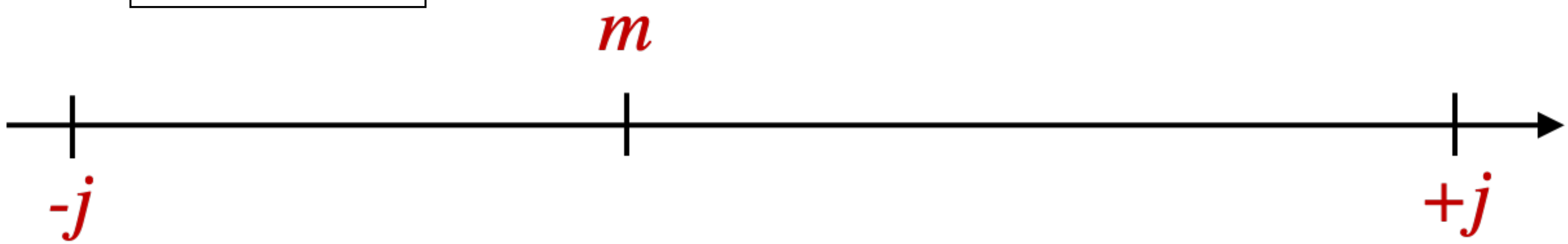
(j,m) ADIMENSIONAIS

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

$\underline{k}$ ROTULA OS AUTO-VETORES COMUNS DE J^2 E J_z COM OS MESMOS $\underline{j}$ E $\underline{m}$, MAS LINEARMENTE INDEPENDENTES, SE $\{J^2, J_z\}$ NÃO FORMAREM UM CCOC.

EMBORA ESTEJA PRESENTE, OMITIREMOS O $\underline{k}$ NOS PRÓXIMOS SLIDES, POIS ELE SERÁ APENAS UM ESPECTADOR.

Lema I: $\boxed{-j \leq m \leq j}$



PROVA:

$$\| J_+ |j,m\rangle \|^2 \geq 0$$

$$\| J_- |j,m\rangle \|^2 \geq 0$$

SEGUE QUE, SEJA $|\psi\rangle \equiv J_+|j,m\rangle$

$$\langle \psi | = \langle j,m| J_+^\dagger = \langle j,m| J_-$$

$$\| J_+ |j,m\rangle \|^2 = \langle \psi | \psi \rangle =$$

$$= \langle j,m| J_- J_+ |j,m\rangle$$

$$= \langle j,m| (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |j,m\rangle$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$

$$= \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \geq 0 \quad (1)$$

SEMELHANTEMENTE:

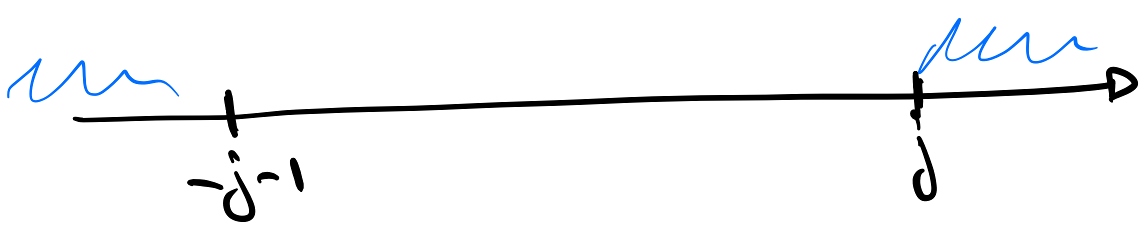
$$
\begin{aligned}
\| J_- |j,m\rangle \|^2 &= \langle j,m| J_+ J_- |j,m\rangle \\
&= \langle j,m| (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |j,m \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 + m] \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m(m-1)] \geq 0 \quad (2)
\end{aligned}
$$

(1): $j(j+1) - m(m+1) \geq 0$

$\Rightarrow (j-m)(j+m+1) \geq 0$

2 POSSIBILIDADES: $j - m \leq 0$ E $j+m+1 \leq 0$

$\Rightarrow m \geq j$ E $m \leq -j-1 \Rightarrow$ IMPOSSÍVEL



$j-m \geq 0$ E $j+m+1 \geq 0$

$\Rightarrow m \leq j$ E $m \geq -j-1 \Rightarrow \boxed{-j-1 \leq m \leq j}$ (3)

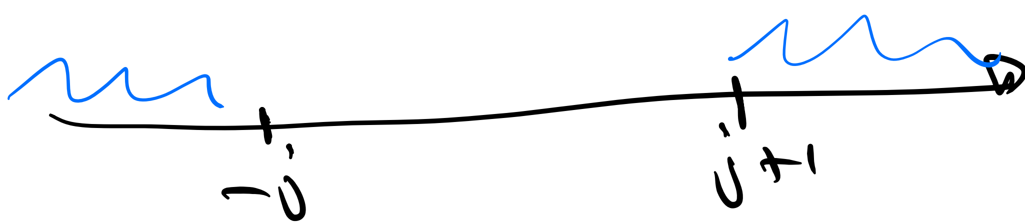
(2): $j(j+1)-m(m-1) \geq 0$

$\Rightarrow (j+m)(j-m+1) \geq 0$

DUAS POSSIBILIDADES:

$j+m \leq 0$ $\quad$ $j-m+1 \leq 0$

$m \leq -j$ $\quad$ $m \geq j+1 \Rightarrow$ IMPOSSÍVEL



$\rightarrow j+m \geq 0$ $\quad$ $j-m+1 \geq 0$

$\Rightarrow \boxed{-j \leq m \leq j+1}$ (4)

(3) E (4) IMPÕEM:

$\boxed{-j \leq m \leq j}$

Lema II: (i) $J_-|j, m=-j\rangle = 0$

DE (2): $\| J_-|j, m=-j\rangle \|^2 =$

$$= \hbar^2 [j(j+1) - j(j+1)] = 0$$

SEGUE QUE $J_-|j, m=-j\rangle = 0$ ✓

(ii) SE $m > -j$, ENTÃO $J_-|j, m\rangle$ É UM AUTO-VETOR DE J^2 E J_z COM AUTO-VALORES $j(j+1)\hbar^2$ E $(m-1)\hbar$, RESPECTIVAMENTE

PROVA: PRIMEIRAMENTE $J_-|j, m\rangle$ É NÃO NULO PORQUE, DE (2) $\| J_-|j, m\rangle \|^2 > 0$. ALÉM DISSO:

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_- \Rightarrow J_z J_- - J_- J_z = -\hbar J_-$$

APLICANDO EM $|j,m\rangle$ $(m > -j)$

$$(J_z J_- - J_- J_z)|j,m\rangle = -\hbar J_- |j,m\rangle$$

$$J_z[J_-|j,m\rangle] - m\hbar J_-|j,m\rangle = -\hbar J_-|j,m\rangle$$

$$J_z[J_-|j,m\rangle] = (m-1)\hbar[J_-|j,m\rangle] \checkmark$$

OU SEJA, J_- "ABAIXA" m DE $\underline{1}$

DE $[J^2, J_-] = 0$, APLICANDO EM $|j,m\rangle$:

$$J^2[J_-|j,m\rangle] = J_- J^2 |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2[J_-|j,m\rangle]$$

Lema III:

(i) $J_+|j, m=j\rangle = 0$

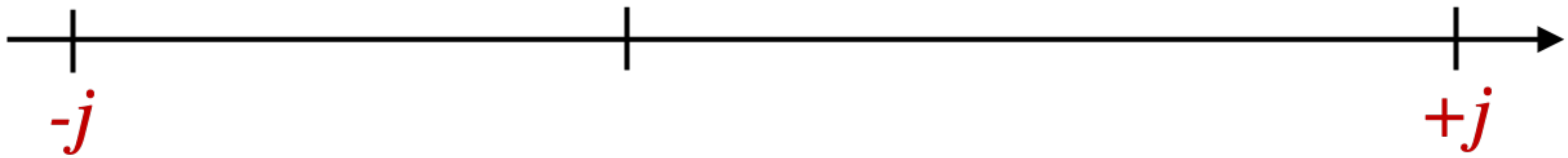
(ii) $J_+|j,m\rangle$ $(m<j)$ É AUTO-VETOR COMUM DE J^2 E J_z COM AUTO-VALORES $j(j+1)\hbar^2$ E $(m+1)\hbar$, RESPECTIVAMENTE.

A PROVA É ANÁLOGA AO DO LEMA II.

J_+ "LEVANTA" m PARA $m+1$

O espectro de J^2 e J_z

$m = -j + p = +j - q$



1) $\boxed{m = -j + p}$ ONDE p É INTEIRO E $p \geq 0$

PORQUE, SE APLICO J_- p VEZES:

$$(J_-)^p |j, m = -j + p\rangle \propto |j, m = -j\rangle$$

$$J_- |j, m = -j\rangle = 0$$

2) $\boxed{m = j - q}$ ONDE q É INTEIRO E $q \geq 0$

$$(J_+)^q |j, m = j - q\rangle \propto |j, m = j\rangle \quad \text{E} \quad J_+ |j, m = j\rangle = 0$$

SEGUE QUE: $m = -j + p = j - q$

$\Rightarrow 2j = p + q \Rightarrow \boxed{j = \frac{p+q}{2}}$ $\quad p \geq 0$, $q \geq 0$ $\quad p, q \in \mathbb{N}$

PORTANTO:

$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, 4, \ldots$

j PODE ASSUMIR VALORES INTEIROS (≥ 0)

O SEMI-INTEIROS (≥ 0)

E, DADO O VALOR j:

$$\underbrace{-j, -j+1, -j+2, \ldots, j-1, j}_{(2j+1)\text{ VALORES POSSÍVEIS DE } \underline{m}}$$

EXEMPLOS:

a) $j=0$, $m=0$ $\Rightarrow$ $|k,0,0\rangle$ SÓ HÁ UM ESTADO

b) $j=\frac{1}{2}$, $m=-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\Rightarrow$ $\left.\begin{array}{l} |k,j=\frac{1}{2},m=\frac{1}{2}\rangle \text{ E} \\ |k,j=\frac{1}{2},m=-\frac{1}{2}\rangle \end{array}\right\}$ 2 ESTADOS

SPIN-$\frac{1}{2}$ DO CAP. 4

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

$$= \frac{3}{4}\hbar^2|j=\tfrac{1}{2},m\rangle$$

$$\left((S_x^2+S_y^2+S_z^2)|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle \right)$$

$$J_z|j=\tfrac{1}{2},m\rangle = m\hbar|j=\tfrac{1}{2},m\rangle$$

$$\left[S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle \right]$$

c) $j=1$, $m=-1,0,1$

$|j=1, m=1\rangle$

$|j=1, m=0\rangle$

$|j=1, m=-1\rangle$

E ASSIM POR DIANTE

A representação padrão $|k, j, m\rangle$

COMO $\underline{k}$ ROTULA AUTO-ESTADOS L.I. DE MESMO $\underline{j}$ E $\underline{m}$: $\langle k', j, m | k, j, m\rangle = \delta_{k,k'}$

FIXADOS $\underline{j}$ E $\underline{m}$, $\underline{k}$ CORRE POR VALORES TAIS QUE O SUB-ESPAÇO $\mathcal{E}(j,m)$ TEM DEGENERESCÊNCIA $g(j,m)$. NA VERDADE, $g(j,m) = g(j)$ QUE NÃO DEPENDE $\underline{m}$!

PODE-SE DEFINIR SEMPRE UMA BASE PADRÃO:

$|k, j, m\rangle$ TAIS QUE:

- ORTOGONALIDADE: $\langle k', j', m' | k, j, m\rangle = \delta_{kk'}\, \delta_{jj'}\, \delta_{m,m'}$

- FECHAMENTO:

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

E:

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

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

$$J_\pm |k, j, m\rangle \propto |k, j, m\pm 1\rangle$$

DE (1) E (2):

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

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

JÁ QUE $\| J_+ |k, j, m\rangle \|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \underbrace{\langle k, j, m+1 | k, j, m+1\rangle}_{1}$

As matrizes de J_x, J_y, J_z são universais na representação padrão

USANDO: $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$

$$J_y = \frac{i}{2}(J_- - J_+)$$

CONSTRUÍMOS, EM CADA SUB-ESPAÇO DE $\underline{j}$ E $\underline{k}$ FIXOS, AS MATRIZES DE J_x, J_y, J_z, J^2

a) $j=0$, $m=0$ $\quad J_x, J_y, J_z, J^2 \Rightarrow (0)$

b) $j=\frac{1}{2}$, $m=\pm\frac{1}{2}$ $\quad J_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$; $J^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$J_+ \left|m=-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \hbar \sqrt{\underbrace{j(j+1)}_{\frac{3}{4}} - \underbrace{m(m+1)}_{\frac{1}{4}}}\;\Bigg|_{\substack{j=\frac{1}{2} \\ m=-\frac{1}{2}}} \left|m=\tfrac{1}{2}\right\rangle = \hbar \left|m=\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$J_- |m = \tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\, |m = -\tfrac{1}{2}\rangle$

$J_+ |m = \tfrac{1}{2}\rangle = 0$

$J_- |m = -\tfrac{1}{2}\rangle = 0$

$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$J_y = \frac{i}{2}(J_- - J_+) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Exemplos

c) $j=1$:

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad J^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

C.C.O.C. com (J^2, J_z)

TIPICAMENTE, OUTROS OPERADORES SÃO NECESSÁRIOS PARA QUE, JUNTAMENTE COM J^2 E J_z, TENHAMOS UM CCOC. POR EXEMPLO, NUM PROBLEMA DE FORÇA CENTRAL COM:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(r)$$

$\{H, L^2, L_z\}$ FORMAM UM CCOC.