# A REPRESENTAÇÃO PADRÃO $|k, j, m\rangle$

VAMOS AGORA ESTUDAR ALGUMAS PROPRIEDADES DA REPRESENTAÇÃO CUJA BASE SÃO OS ESTADOS $|k\, j\, m\rangle$. COMO VIMOS, O "RÓTULO" $\underline{k}$ CONTÉM TODOS OS ÍNDICES NECESSÁRIOS PARA DISTINGUIR OS AUTO-VETORES SIMULTÂNEOS DE $J^2$ E $J_z$ ORTOGONAIS ENTRE SI:

$$\langle k, j, m | k', j, m\rangle = \delta_{k,k'}$$

CADA SUB-ESPAÇO $\mathcal{E}(j, m)$ DE AUTO-VETORES DE $J^2$ E $J_z$ COM AUTO-VALORES $j(j+1)\hbar^2$ E $m\hbar$ TEM UMA CERTA DE DEGENERESCÊNCIA $g(j, m)$. É POSSÍVEL MOSTRAR QUE ESSA DEGENERESCÊNCIA NÃO DEPENDE DE $\underline{m}$.

$$\Rightarrow g(j, m) \equiv g(j)$$

A PROVA É DADA NA SEÇÃO C-3-a DO CAP. VI DO LIVRO.

COM ISSO, É POSSÍVEL CONSTRUIR UMA BASE "PADRÃO" DO ESPAÇO DE ESTADOS COM AS SEGUINTES PROPRIEDADES:

ORTOGONALIDADE:

$$\langle k, j, m | k', j', m' \rangle = \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}$$

FECHAMENTO:

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

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

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

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

A REPRESENTAÇÃO DAS COMPONENTES DE $\vec{J}$ NA BASE PADRÃO SÃO UNIVERSAIS, OU SEJA, NÃO DEPENDEM DE $k$.

AS CONSTANTES QUE APARECEM NA AÇÃO DE $J_\pm$ VEM DA NORMALIZAÇÃO, COMO PODE SER VISTO NAS EQS. (1) E (2) DO LEMA I.

COM ISSO, TEMOS OS ELEMENTOS DE MATRIZ:

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

$$\langle k, j, m | J_\pm | k', j', m' \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \, \delta_{kk'} \delta_{jj'} \times$$
$$\times \, \delta_{m, m' \pm 1}$$

OS OBSERVÁVEIS $J_x$ E $J_y$ SÃO OBTIDOS DE $J_\pm$ ATRAVÉS DE:

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

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

EXEMPLOS: NOS SUB-ESPAÇOS DE $(k, j)$ FIXOS:

(i) $j=0$: NESSE CASO, O ESPAÇO TEM DIMENSÃO $(2j+1)=1$, E A "MATRIZES" DE $J_x, J_y, J_z$ SÃO TODAS IGUAIS A ZERO.

(ii) $j=1/2$: DIMENSÃO $= 2\times\frac{1}{2}+1=2$; $m=\pm\frac{1}{2}$

$$J_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix};\quad J_+=\hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix};\quad J_-=\hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

$$J_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix};\quad J_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix};\quad \vec{J}^2=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

COMO JÁ TÍNHAMOS VISTO NO CAPÍTULO 4 PARA PARTÍCULAS DE SPIN ½.

(iii) $j=1$: DIMENSÃO $= 2\times1+1=3$; $m=1,0,-1$

$$J_z=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix};\quad J_+=\hbar\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\0&0&\sqrt{2}\\0&0&0\end{pmatrix}$$

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

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

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

E ASSIM POR DIANTE.

ALÉM DISSO, EM VÁRIAS SITUAÇÕES, OS OUTROS OBSERVÁVEIS NECESSÁRIOS PARA FORMARMOS UM C.C.O.C. COM $J^2$ E $J_z$ COMUTAM NÃO SÓ COM $J^2$ E $J_z$, MAS TAMBÉM COM $J_x$ E $J_y$. NESSE CASO, PODE-SE PROVAR QUE OS AUTOVALORES DESSES OUTROS OBSERVÁVEIS NÃO DEPENDEM DE $m$. SE APENAS MAIS UM OBSERVÁVEL $A$ FOR NECESSÁRIO:

$$A\,|k,j,m\rangle = a_{k,j}\,|k,j,m\rangle$$

NO CASO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO, $A=H$ (HAMILTONIANO) E AS ENERGIAS NÃO DEPENDEM DE $m$. NA VERDADE, PARA O POTENCIAL COULOMBIANO, ELAS NÃO DEPENDEM NEM DO $j$, MAS ISSO NÃO É VERDADE PARA OUTROS POTENCIAIS CENTRAIS

$$V(r) \neq \frac{K}{r}$$

# APLICAÇÃO AO MOMENTO ANGULAR ORBITAL

A TEORIA DESENVOLVIDA ATÉ AQUI É TODA BASEADA NAS RELAÇÕES DE COMUTAÇÃO:

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

VAMOS AGORA APLICÁ-LA A UM CASO PARTICULAR IMPORTANTE, QUE SERVIU DE MOTIVAÇÃO INICIAL: O MOMENTO ANGULAR ORBITAL.

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

VAMOS TRABALHAR NA REPRESENTAÇÃO $|\vec{r}\rangle$ NA QUAL ESSES OPERADORES ATUAM COMO:

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right); L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right); L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

É MAIS CONVENIENTE TRABALHAR EM COORDENADAS ESFÉRICAS QUE CARTESIANAS.

$$x = r\sin\theta\cos\phi \qquad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \qquad \tan\theta = \sqrt{x^2+y^2}/z$$

$$z = r\cos\theta \qquad \tan\phi = y/x$$

PARA USO POSTERIOR, PRECISAREMOS DO ELEMENTO DE VOLUME:

$$dx\,dy\,dz = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \equiv r^2 dr\, d\Omega$$

ONDE DEFINIMOS O ELEMENTO DE ÂNGULO ESFÉRICO:

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

LEMBREM-SE DE QUE: $r \in [0, +\infty)$, $\theta \in [0, \pi]$
$\phi \in [0, 2\pi)$

MUDANDO AGORA VARIÁVEIS NOS OPERADORES DE MOMENTO ANGULAR:

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

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

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

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

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

A DERIVAÇÃO DESSAS EXPRESSÕES É LONGA, MAS TRIVIAL. BASTA USAR:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \ldots$$

USANDO AS EXPRESSÕES ACIMA PARA $L^2$ E $L_z$ QUEREMOS ACHAR AS AUTO-FUNÇÕES QUE SATISFAZEM SIMULTANEAMENTE:

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

E

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

COMO OS OPERADORES NÃO DEPENDEM DE $r$, É EVIDENTE QUE AS SOLUÇÕES SÃO DA FORMA:

$$\psi_{k\ell m}(r,\theta,\phi) = f_{k\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

QUE $f_{k\ell}(r)$ NÃO DEPENDA DE $m$ DECORRE DA FORMA DA BASE PADRÃO. AS FUNÇÕES $\psi_{k\ell m}(r,\theta,\phi)$ SERÃO NORMALIZADAS, POR CONVENIÊNCIA, SEPARADAMENTE NA PARTE RADIAL E ANGULAR:

$$\int_0^\infty r^2 |f_{k\ell}(r)|^2 dr = 1 \; ; \; \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, \sin\theta \, |Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2 = 1$$

EQUAÇÃO PARA $L_z$:

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m \, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

CUJAS SOLUÇÕES SÃO DO TIPO:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = F_{\ell m}(\theta) e^{im\phi}$$

DA CONTINUIDADE DE $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ EM $\phi = 0, 2\pi$:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi = 0) = Y_{\ell m}(\theta, \phi = 2\pi)$$

$$\Rightarrow \quad 1 = e^{2\pi i m} \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

OU SEJA, $\underline{m}$ TEM QUE SER INTEIRO. COMO

$$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, \ell-1, \ell$$

SEGUE QUE $\underline{\ell}$ TAMBÉM TEM QUE SER INTEIRO:

$$\ell = 0, 1, 2, \ldots$$

OU SEJA, $\ell$ NÃO PODE ASSUMIR VALORES SEMI-INTEIROS.

ALÉM DISSO, SABEMOS QUE:

$$L_+ Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = 0$$

OU SEJA:

$$e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) F_{\ell\ell}(\theta)\, e^{i\ell\phi} = 0$$

DONDE:

$$\left(\frac{d}{d\theta} - \frac{\ell}{\tan\theta}\right) F_{\ell\ell}(\theta) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d F_{\ell\ell}(\theta)}{d\theta} = \frac{\ell}{\tan\theta} F_{\ell\ell}(\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{d\{\ln[F_{\ell\ell}(\theta)]\}}{d\theta} = \ell\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = \ell\,\frac{d[\ln(\sin\theta)]}{d\theta}$$

$$\Rightarrow \ln[F_{\ell\ell}(\theta)] - \ell \ln(\sin\theta) = \text{CONST.} = C'_\ell$$

$$\ln\left[\frac{F_{\ell\ell}(\theta)}{(\sin\theta)^\ell}\right] = C'_\ell \Rightarrow \boxed{F_{\ell\ell}(\theta) = C_\ell (\sin\theta)^\ell}$$

A SOLUÇÃO ENCONTRADA É ÚNICA JÁ QUE A CONSTANTE $C_\ell$ É FIXADA PELA NORMALIZAÇÃO, COMO SEMPRE:

$$\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, \sin\theta \, |C_\ell (\sin\theta)^\ell e^{i\ell\phi}|^2 =$$

$$= |C_\ell|^2 \times 2\pi \int_0^{\pi} \sin\theta \, (\sin\theta)^{2\ell} d\theta \quad (\mu = \cos\theta)$$

$$= 2\pi |C_\ell|^2 \int_{-1}^{+1} (1-\mu^2)^\ell d\mu$$

A INTEGRAL ACIMA PODE SER CALCULADA PARA QUALQUER VALOR DE $\underline{\ell}$ (COMPLEMENTO $A_{VI}$):

$$\int_{-1}^{+1} (1-\mu^2)^\ell d\mu = \frac{2^{(2\ell+1)} (\ell!)^2}{(2\ell+1)!}$$

DE TAL FORMA QUE:

$$|C_\ell| = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

POR CONVENIÊNCIA POSTERIOR, A SEGUINTE ESCOLHA DE FASE É FEITA:

$$C_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

FINALMENTE, PODEMOS CONSTRUIR AS OUTRAS AUTO-FUNÇÕES ÚNICAS:

$$Y_{\ell,\ell-1}(\theta,\phi),\ Y_{\ell,\ell-2}(\theta,\phi),\ \dots\ Y_{\ell,-\ell}(\theta,\phi)$$

ATRAVÉS DA APICAÇÃO SUCESSIVA DE $L_-$.
ESSAS AUTO-FUNÇÕES $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ DE $L^2$ E $L_z$ SÃO CHAMADAS DE HARMÔNICOS ESFÉRICOS.

DA NORMALIZAÇÃO ANTERIORMENTE DISCUTIDA TEMOS:

$$L_\pm Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\; Y_{\ell(m\pm1)}(\theta,\phi)$$

OU, USANDO A FORMA DE $L_\pm$ E $\frac{\partial e^{im\phi}}{\partial\phi} = im$:

$$e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m}{\tan\theta}\right)Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\; Y_{\ell(m\pm1)}(\theta,\phi)$$

EXEMPLOS DOS PRIMEIROS HARMÔNICOS ESFÉRICOS

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\begin{cases} Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\, \sin\theta\ \mathrm{e}^{\pm i\varphi} \\ Y_1^{0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\, \cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\, \sin^2\theta\ \mathrm{e}^{\pm 2i\varphi} \\ Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\, \sin\theta\cos\theta\ \mathrm{e}^{\pm i\varphi} \\ Y_2^{0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\, (3\cos^2\theta - 1) \end{cases}$$

# PROPRIEDADES IMPORTANTES DOS HARMÔNICOS ESF.

## ORTONORMALIZAÇÃO:

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

## EXPANSÃO DE FUNÇÕES DE $\theta$ E $\phi$:

QUALQUER FUNÇÃO DE $\theta$ E $\phi$, $f(\theta,\phi)$, PODE SER EXPANDIDA EM HARMÔNICOS ESFÉRICOS:

$$f(\theta,\phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell,m} Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

ONDE $C_{\ell,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi) f(\theta,\phi)$

## FECHAMENTO NO ESPAÇO DE FUNÇÕES DE $\theta$ E $\phi$:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell m}(\theta',\phi') Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \delta(\cos\theta - \cos\theta')\,\delta(\phi-\phi')$$

$$= \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\,\delta(\phi-\phi')$$

## COMPLEXO CONJUGADO

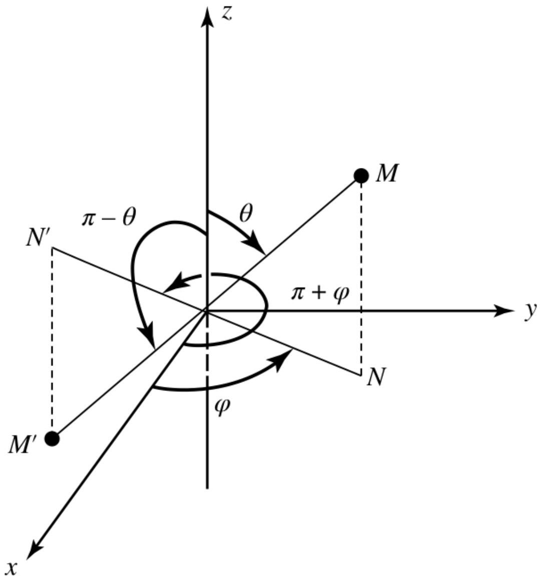
$$\left[Y_{\ell m}(\theta,\phi)\right]^* = (-1)^m Y_{\ell(-m)}(\theta,\phi)$$

# PARIDADE

A OPERAÇÃO DE INVERSÃO CORRESPONDE A $\vec{r} \to -\vec{r}$

EM TERMOS DE COORDENADAS ESFÉRICAS, ELA FICA:

$$r \to r$$
$$\theta \to \pi - \theta$$
$$\phi \to \phi + \pi$$




APLICANDO AOS HARMÔNICOS ESFÉRICOS:

$$Y_{\ell m}(\pi-\theta, \phi+\pi) = (-1)^{\ell}\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

EM PALAVRAS, OS HARMÔNICOS ESFÉRICOS PARES SÃO PARES POR INVERSÃO E OS ÍMPARES SÃO ÍMPARES.