VALORES ESPERADOS

PODEMOS OBTER UMA VISÃO SOBRE OS ESTADOS $|k,\ell,m\rangle$ DA BASE PADRÃO CALCULANDO ALGUNS VALORES ESPERADOS:

$$\langle k,\ell,m|L_z|k,\ell,m\rangle = m\hbar$$

$$\langle k,\ell,m|L_x|k,\ell,m\rangle = \frac{1}{2}\langle k,\ell,m|(L_+ + L_-)|k,\ell,m\rangle = 0$$

JÁ QUE $L_\pm|k,\ell,m\rangle \propto |k,\ell,m\pm 1\rangle$. ANALOGAMENTE,

$$\langle k,\ell,m|L_y|k,\ell,m\rangle = \frac{i}{2}\langle k,\ell,m|(L_- - L_+)|k,\ell,m\rangle = 0$$

A PARTIR DE AGORA, USAREMOS A NOTAÇÃO SIMPLIFICADA: $\langle k,\ell,m|A|k,\ell,m\rangle \equiv \langle A\rangle$

$$\langle L^2\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2$$

$$\langle L_x^2\rangle = \frac{1}{4}\langle (L_+ + L_-)(L_+ + L_-)\rangle = \frac{1}{4}\langle (L_+^2 + L_-^2 + L_+L_- + L_-L_+)\rangle$$

$$= \frac{1}{4}\langle (L_+L_- + L_-L_+)\rangle$$

MOSTRAMOS ANTES QUE: $L_+L_- + L_-L_+ = 2(L^2 - L_z^2)$

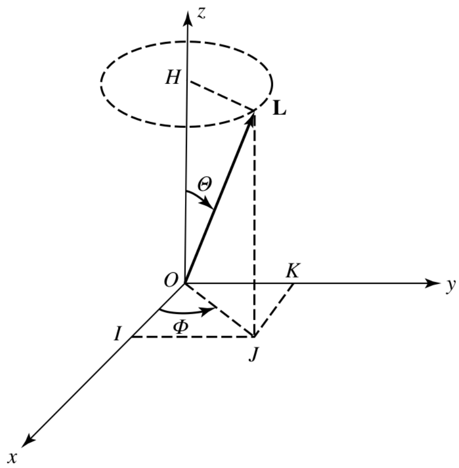
$$\langle L_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle (L^2 - L_z^2) \rangle = [l(l+1) - m^2] \frac{\hbar^2}{2}$$

ANALOGAMENTE:

$$\langle L_y^2 \rangle = -\frac{1}{4} \langle (L_-^2 + L_+^2 - L_- L_+ - L_+ L_-) \rangle$$

$$= \frac{1}{4} \langle (L_+ L_- + L_- L_+) \rangle = [l(l+1) - m^2] \frac{\hbar^2}{2}$$

ESSES RESULTADOS PERMITEM FORMAR UMA VISÃO CLÁSSICA, ILUSTRADA NA SEGUINTE FIGURA



NA FIGURA, O VETOR $\overrightarrow{OL}$ TEM MÓDULO $\sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$ E PROJEÇÃO NO EIXO z $OH = m\hbar$

SUA PROJEÇÃO NO PLANO xy É:

$$OJ = \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2}\,\hbar$$

AS COMPONENTES x E y SÃO

$$L_x = OJ \cos \Phi$$
$$L_y = OJ \sin \Phi$$

SUPONHA QUE $\underline{OL}$, $\underline{OH}$ E $\underline{OJ}$ SÃO BEM DETERMINADOS, MAS O ÂNGULO Φ É ALEATÓRIO DISTRIBUÍDO UNIFORMEMENTE NO INTERVALO $[0, 2\pi)$

NESSE CASO, A MÉDIA DE UMA FUNÇÃO QUALQUER DE Φ, $f(\Phi)$, É:

$$\langle f(\Phi)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(\Phi)\, d\Phi$$

ASSIM:

$$\langle L_x \rangle = \frac{OJ}{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos\Phi \, d\Phi = 0$$

$$\langle L_y \rangle = \frac{OJ}{2\pi}\int_0^{2\pi} \sin\Phi \, d\Phi = 0$$

MAS:

$$\langle L_x^2 \rangle = \frac{(OJ)^2}{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2\Phi \, d\Phi = \frac{(OJ)^2}{2} = \frac{\ell(\ell+1)-m^2}{2}\hbar^2$$

$$\langle L_y^2 \rangle = \frac{(OJ)^2}{2\pi}\int_0^{2\pi} \sin^2\Phi \, d\Phi = \frac{(OJ)^2}{2} = \frac{\ell(\ell+1)-m^2}{2}\hbar^2$$

QUE CORRESPONDEM EXATAMENTE AO RESULTADO QUÂNTICO. DO PONTO DE VISTA DOS VALORES ESPERADOS DE $L_x, L_x^2, L_y, L_y^2, L_z, L^2$ PODEMOS PENSAR EM $\vec{L}$ COMO UM VETOR DE MÓDULO E PROJEÇÃO EM z FIXOS, MAS TAL QUE O ÂNGULO Φ É ALEATÓRIO E UNIFORMEMENTE DISTRIBUÍDO NO INTERVALO $[0, 2\pi)$.

ENTRETANTO, CUIDADO! ESSAS ANALOGIAS CLÁS-SICAS NUNCA SÃO PERFEITAS. POR EXEMPLO, QUALQUER MEDIDA DE L_x OU L_y NO ESTADO $|k, \ell, m\rangle$ SÓ PODE DAR COMO RESULTADO ALGUM DOS VALORES:

$$-\ell\hbar, (-\ell+1)\hbar, \ldots, (\ell-1)\hbar, \text{ OU } \ell\hbar$$

QUE SÃO OS AUTO-VALORES DE L_x E L_y.

AUTO-FUNÇÕES DE L^2 E L_z NO ESPAÇO $\mathcal{F}$

SE NOS FOR DADA A FUNÇÃO DE ESTADO DE UMA PARTÍCULA (JÁ EM COORDENADAS ESFÉRICAS)

$$\psi(r,\theta,\phi)$$

PODEMOS NOS PERGUNTAR SOBRE AS PROBABILIDADES DE MEDIDAS DE L^2 E L_z. PARA ISSO, É ÚTIL TRABALHAR COM AS AUTO-FUNÇÕES DE L^2 E L_z JÁ OBTIDAS NA BASE PADRÃO:

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

LEMBRAMOS QUE ELAS JÁ ESTÃO ORTONORMALIZADAS "SEPARADAMENTE":

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

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

(NOTE QUE OS $\underline{l}$ SÃO IGUAIS NA ÚLTIMA EXPRESSÃO)

ASSIM, UM ESTADO NORMALIZADO QUALQUER PODE SER EXPANDIDO NESSA BASE:

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

OU:

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

ONDE:

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

PROBABILIDADES: PRIMEIRO MÉTODO

PODEMOS AGORA PERGUNTAR: QUAL É A PROBABILIDADE DE UMA MEDIDA SIMULTÂNEA DE L^2 E L_z DAR UM CERTO PAR DE RESULTADOS $\ell(\ell+1)\hbar^2$ E $m\hbar$?

DOS POSTULADOS:

$$P_{L^2,L_z}(\ell,m) = \sum_{k=1}^{g(\ell)} |C_{k\ell m}|^2$$

NOTE QUE A SOMA SOBRE k É NECESSÁRIA PORQUE DEVE-SE SOMAR NO AUTO-SUB-ESPAÇO DE (ℓ,m).

SE QUISERMOS APENAS AS PROBABILIDADES DE UMA MEDIDA DE L^2:

$$P_{L^2}(\ell) = \sum_{k=1}^{g(\ell)} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |C_{k\ell m}|^2$$

FINALMENTE, SE QUISERMOS AS PROBABILIDADES DE UMA MEDIDA DE L_z:

$$P_{L_z}(m) = \sum_{\ell \geq |m|} \sum_{k=1}^{g(\ell)} |C_{k\ell m}|^2$$

A RESTRIÇÃO NA SOMA SOBRE $\underline{\ell}$ VEM DO FATO DE QUE $|m| \leq \ell$.

SEGUNDO MÉTODO:

COMO O MOMENTO ANGULAR SÓ ENVOLVE A PARTE ANGULAR DA FUNÇÃO DE ONDA, PODEMOS ESCREVER DE OUTRA FORMA ESSES RESULTADOS. EXPANDINDO APENAS A PARTE ANGULAR:

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

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

$$a_{\ell m}(r) = \sum_k C_{k\ell m} R_{k\ell}(r)\,; \quad C_{k\ell m} = \int_0^{\infty} r^2 dr\, R^*_{k\ell}(r)\, a_{\ell m}(r)$$

MAS:

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

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

$$= \sum_k |C_{k\ell m}|^2$$

$$= P_{L^2, L_z}(\ell, m)$$

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

A PARTIR DESSA EXPRESSÃO, PODEMOS OBTER TAMBÉM:

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

E

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

ESSAS FÓRMULAS SÃO ÚTEIS PORQUE SÓ PRECISAMOS EXPANDIR A PARTE ANGULAR DE $\psi(r,\theta,\phi)$

FINALMENTE, SE SÓ NOS INTERESSA $\hat{L}_z$, PODEMOS EXPANDIR APENAS A DEPENDÊNCIA EM ϕ. NOTAMOS QUE PODEMOS ESCREVER OS HARMÔNICOS ESFÉRICOS COMO:

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

DE TAL FORMA QUE:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \, \frac{e^{-im'\phi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} = \delta_{m,m'} \, ; \quad \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \, Z^*_{\ell' m}(\theta) Z_{\ell m}(\theta) = \delta_{\ell,\ell'}$$

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

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

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

MAS: $\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \, |b_m(r,\theta)|^2 =$

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \sum_{\ell\ell'} a^*_{\ell'}(r) Z^*_{\ell' m}(\theta) \, a_\ell(r) Z_{\ell m}(\theta) =$$

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

COMPARANDO COM A EXPRESSÃO ANTERIOR:

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

ALGUNS EXEMPLOS

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

ONDE ASSUMIMOS (SEM PERDA DE GENERALIDADE) QUE AS DUAS FUNÇÕES SÃO NORMALIZADAS SEPARADAMENTE:

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

NESSE CASO, PODEMOS USAR O 2º MÉTODO:

$$g(r,\theta) = \sum_{\ell,m} d_{\ell,m} Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

ONDE:

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

DONDE:

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

PORTANTO:

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

JÁ QUE $f(r)$ JÁ ESTÁ NORMALIZADA.

NOTE QUE ESSA PROBABILIDADE <u>NÃO</u> DEPENDE DE $f(r)$! CLARO QUE TEMOS TAMBÉM:

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

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

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

COM NORMALIZAÇÕES SEPARADAS

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

COMO ESSE É UM CASO ESPECIAL DO EXEMPLO (A) PODEMOS SIMPLESMENTE USAR OS RESULTADOS DE (A) COM:

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

PORÉM, SE QUISERMOS APENAS $P_{L_z}(m)$, PODEMOS USAR O 3º MÉTODO:

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

PORTANTO:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_m \underbrace{c_m f(r) h(\theta)}_{b_m(r,\theta)} \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

LOGO:

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

POR EXEMPLO, SE: $h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}$; $k(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

(NOTEM QUE JÁ ESTÃO NORMALIZADAS) ENTÃO:

$$g(r,\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = Y_{0,0}(\theta,\phi)$$

NA NOTAÇÃO DO EXEMPLO (A). PORTANTO:

$$d_{\ell m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi) Y_{0,0}(\theta,\phi) = \delta_{\ell,0}\, \delta_{m,0}$$

LOGO, $P_{L^2,L_z}(0,0) = P_{L^2}(0) = P_{L_z}(0) = 1$ E AS OUTRAS PROBABILIDADES SÃO TODAS NULAS. SÓ SE PODE OBTER $\ell = 0$ E $m = 0$ COMO RESULTADO DE MEDIDAS DE L^2 E L_z

POR OUTRO LADO, SUPONHA QUE:

$$h(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos\theta \qquad k(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

NESSE CASO, COMO: $Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$

$$\Rightarrow h(\theta)k(\phi) = Y_{1,0}(\theta,\phi) = g(\theta,\phi)$$

E SÓ SE PODE OBTER $l=1$ E $m=0$ COMO RESULTADOS DE MEDIDAS DE L^2 E L_z

FINALMENTE, TOMEMOS:

$$h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \text{E} \qquad k(\phi) = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

É IMEDIATO, POR INSPEÇÃO, QUE:

$$k(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad \text{SE} \qquad c_m = \delta_{m,1}$$

PORTANTO, UMA MEDIDA DE L_z NOS DÁ $m=1$ COM PROBABILIDADE $\underline{1}$.

E QUANTO A MEDIDAS DE L^2? NESSE CASO,

$$g(\theta,\phi)=\frac{e^{i\phi}}{\sqrt{4\pi}}$$

E:

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

O CÁLCULO DESSA INTEGRAL REQUER PROPRIEDADES DOS ESFÉRICOS HARMÔNICOS QUE NÃO ESTUDAMOS. POR COMPLETEZA, MOSTRAREMOS COMO FAZÊ-LO. USANDO (66) DO COMPLEMENTO A_{VI}: ($P_{\ell m}(x)$ SÃO FUNÇÕES ASSOCIADAS DE LEGENDRE)

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi)=(-1)^m\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\,P_{\ell m}(\cos\theta)\,e^{im\phi}\qquad (m>0)$$

COM ISSO, PODEMOS OBTER A INTEGRAL EM ϕ:

$$d_{\ell,m}=\delta_{m,1}(-1)\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-1)!}{(\ell+1)!}}\left(\frac{2\pi}{\sqrt{4\pi}}\right)\int_0^{\pi}\sin\theta\, P_{\ell 1}(\cos\theta)\,d\theta$$

$$=-\delta_{m,1}\left(\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)}}\int_0^{\pi}\sin\theta\, P_{\ell 1}(\cos\theta)\,d\theta$$