§ Grupo de Rotações, dim 3

O grupo de Rotações é um subgrupo do grupo Ortogonal $O(3)$, como veremos mais a frente.
As transformações ortogonais deixam invariante a distância em $\mathbb{R}^3$ e também o produto escalar entre vetores ordinários. Seja $R \in O(3)$

$$R\vec{a} \equiv \vec{a}\,', \quad R\vec{b} \equiv \vec{b}\,'$$

Usando uma base ortonormal, representamos R por uma matriz real (3×3):

$$a'_i = \sum_j R_{ij}\, a_j \quad , \quad b'_k = \sum_m R_{km}\, b_m$$

Fazendo o produto escalar:

$$\vec{a}\,'\cdot\vec{b}\,' = \sum_i a'_i\, b'_i = \sum_{ijk} a_j\, b_k\, R_{ij}\, R_{ik}$$

$$= \sum_{jk} a_j\, b_k \sum_i R_{ij}\, R_{ik}$$

devemos exigir $\displaystyle\sum_i R_{ij} R_{ik} = \sum_i R^T_{ji} R_{ik} = \delta_{jk}$

ou $\quad R^T\cdot R = 1 \, (= R\cdot R^T)$

Aí temos: $\quad \vec{a}\,'\cdot\vec{b}\,' = \vec{a}\cdot\vec{b}$

Conseqüência:

$$\vec{a}' \cdot \vec{a}' = \|\vec{a}'\|^2 = \vec{a} \cdot \vec{a} = \|\vec{a}\|^2$$

Matrizes reais, com $R^T = R^{-1}$, são chamadas matrizes ortogonais.

O grupo tem duas peças. Veja que

$$\det(R^T \cdot R) = 1 = (\det R^T)(\det R)$$

$$= (\det R)^2,$$

com $\det R = \pm 1$

(i) Peça com $\det R = +1$, é um subgrupo de $O(3)$ chamado $SO(3)$, que contém as rotações

(ii) Peça com $\det R = -1$, <u>não</u> é subgrupo. São chamadas de operações 'impróprias'. A operação fundamental é a inversão, que é representada pela matriz

$$I \doteq \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{pmatrix}$$

Seja S_2 o grupo $\{E, I\}$. A inversão I comuta com qualquer otra operação ortogonal. Temos:

$$O(3) = SO(3) \times S_2 \quad ,$$

o grupo ortogonal completo é um produto direto. As representações de S_2 são chamadas de par e ímpar:

S_2	E	I
$\Gamma^{(+)}$	1	1
$\Gamma^{(-)}$	1	-1

Obtidas as RI de $SO(3)$, $\Gamma^{(\ell)}$, as RI's de $O(3)$ são dadas multiplicando pela 'paridade' ($\Gamma^{(+)}$ e $\Gamma^{(-)}$).

Quantos parâmetros independentes tem o grupo?

As condições de ortogonalidade

$$\sum_i R^T_{ji} R_{ik} = \delta_{jk} \quad ,$$

para dim 3, são $\binom{3}{2} + 3 = 6$ relações independentes. Daí, o número de parâmetros do grupo é

$$9 - 6 = 3 \quad , \quad \text{reais todos.}$$

IV

Generalizando essa conta para dim n, obtemos

$$n^2 - \left[\binom{n}{2} + n\right] = \frac{n(n-1)}{2},$$

que é o número de parâmetros reais independentes de $O(n)$.

Dim - 3

A maneira mais simples de parametrizar uma rotação é usar dois parâmetros reais para definir o eixo de rotação e um outro parâmetro real para o ângulo de rotação.

O eixo de rotação (incluindo a orientação) é caraterizado por um vetor unitário

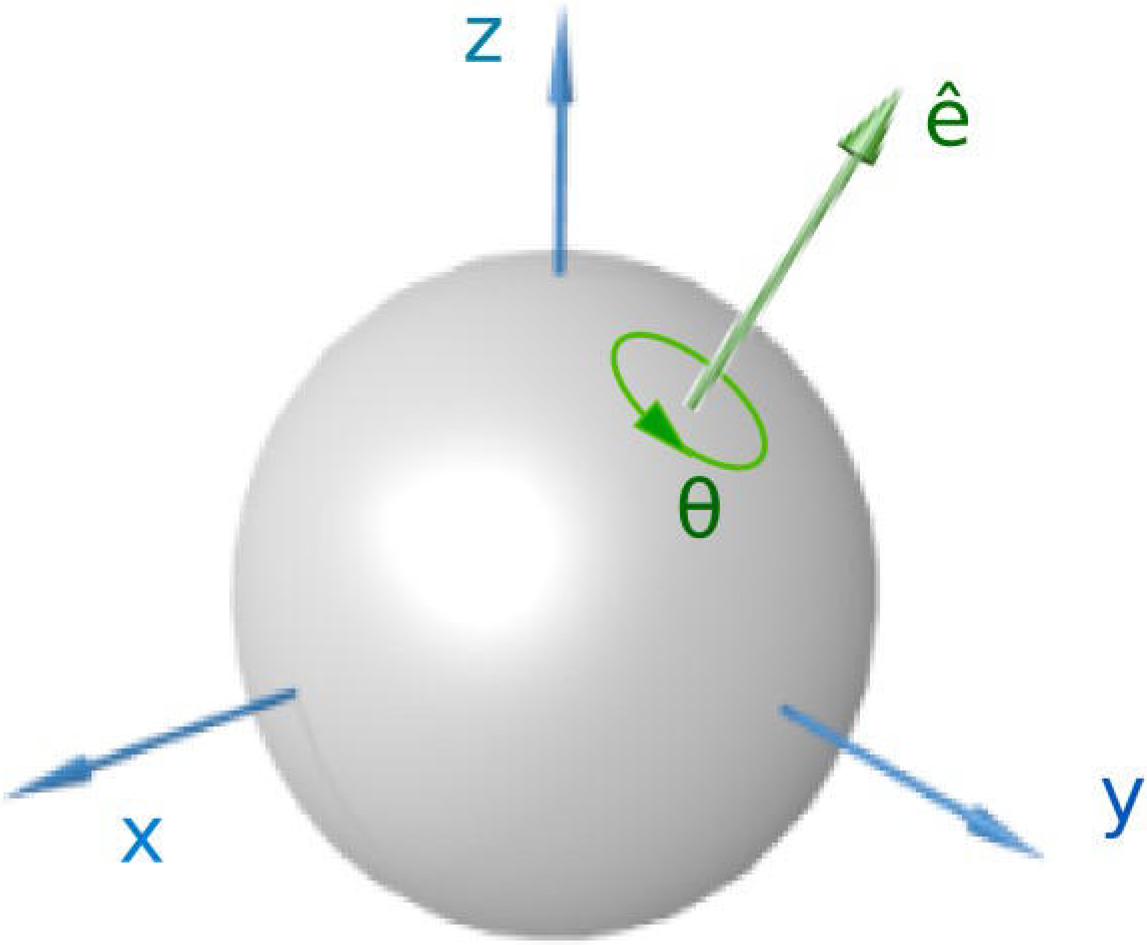
$$\hat{n} = (n_x, n_y, n_z) \quad , \text{com}$$

$$\hat{n}\cdot\hat{n} = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 .$$

Assim escrevemos para $R \in SO(3)$:

$$R = R(\hat{n}, \varphi) \quad ,$$

onde φ é o ângulo de rotação.



z
ê
θ
x
y

§ ROTAÇÕES e MOMENTUM ANGULAR em MECÂNICA QUÂNTICA

Uma rotação espacial R é caraterizada por uma matriz ortogonal (3x3). Queremos agora obter o efeito de uma rotação no espaço dos kets, que representam os possíveis estados do nosso sistema quântico. Associamos com toda rotação R um operador

$$\mathcal{D}(R),$$

tal que o ket rodado $|\psi\rangle_R$ pode ser obtido como:

$$\mathcal{D}(R)|\psi\rangle \equiv |\psi\rangle_R \qquad (1)$$

Seja $R\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{x}'$ a ação no espaço real de uma tal rotação. É natural definir então a ação de $\mathcal{D}(R)$ nos kets $|\underset{\sim}{x}\rangle$ como:

$$\mathcal{D}(R)\,|\underset{\sim}{x}\rangle \equiv |R\underset{\sim}{x}\rangle . \qquad (2)$$

A partir desta definição básica calculamos o efeito na função de onda:

$$\langle \underset{\sim}{x} | \mathcal{D}(R)|\psi\rangle = \langle \underset{\sim}{x}|\psi\rangle_R = \psi_R(\underset{\sim}{x})$$

$$= \int d\underset{\sim}{x}' \langle \underset{\sim}{x}|\mathcal{D}(R)|\underset{\sim}{x}'\rangle \langle \underset{\sim}{x}'|\psi\rangle = \int d\underset{\sim}{x}' \langle \underset{\sim}{x}|R\underset{\sim}{x}'\rangle \psi(\underset{\sim}{x}')$$

Usar agora a mudança de variável:

$$\underset{\sim}{y} \equiv R\underset{\sim}{x}' \quad , \quad \underset{\sim}{x}' = R^{-1}\underset{\sim}{y}$$

O Jacobiano desta transformação é unitário:

$$d\underset{\sim}{x}' = \left| J\left(\underset{\sim}{x}', \underset{\sim}{y} \right) \right| d\underset{\sim}{y} \quad , \left| J(\underset{\sim}{x}', \underset{\sim}{y}) \right| = 1 \, ,$$

porque a matriz R é ortogonal (uma rotação não muda os volumes). Assim

$$\psi_R(\underset{\sim}{x}) = \langle \underset{\sim}{x} | \mathcal{D}(R) | \psi \rangle = \int d\underset{\sim}{y} \, \langle \underset{\sim}{x} | \underset{\sim}{y} \rangle \, \psi(R^{-1}\underset{\sim}{y})$$

$$= \int d\underset{\sim}{y} \, \delta^{(3)}(\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{x}) \, \psi(R^{-1}\underset{\sim}{y}) = \psi(R^{-1}\underset{\sim}{x}) \, ,$$

que fornece a chamada definição de Wigner para a função rodada:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_R(\underset{\sim}{x}) &= \langle \underset{\sim}{x} | \mathcal{D}(R) | \psi \rangle = \psi(R^{-1}\underset{\sim}{x}) \\ &= \langle R^{-1}\underset{\sim}{x} | \psi \rangle \end{aligned}} \qquad (3)$$

<u>Exemplo</u>.

Rotação no eixo $\underline{z}$, com ângulo θ: $R_z(\theta)$

$$R_z \begin{cases} x' = x\cos\theta - y \operatorname{sen}\theta \\ y' = x \operatorname{sen}\theta + y\cos\theta \\ z' = z \end{cases}$$

Rotação infinitesimal com ângulo $\delta\theta$:

$$R_z(\delta\theta) \begin{cases} x' = x - \delta\theta \, y + o(\delta\theta^2) \\ y' = \delta\theta \, x + y + o(\delta\theta^2) \\ z' = z \end{cases}$$

Obtemos a rotação inversa mudando de sinal o ângulo:

$$R_z^{-1}(\theta) = R_z(-\theta) \quad ,$$

e para a rotação infinitesimal temos:

$$R_z(-\delta\theta) \begin{cases} x' = x + \delta\theta\, y \,, \\ y' = -\delta\theta\, x + y \,, \\ z' = z \,, \end{cases}$$

assim que

$$\begin{aligned} \psi_{R_z(\delta\theta)}(\underset{\sim}{x}) &= \psi(R_z(-\delta\theta)\underset{\sim}{x}) \\ &= \psi(x+\delta\theta y, -\delta\theta x + y, z) \\ &= \psi(x,y,z) + \delta\theta\, y\, \partial_x \psi(x,y,z) \\ &\qquad - \delta\theta\, x\, \partial_y \psi(x,y,z) \end{aligned}$$

$$= \left[1 - i\delta\theta \left(\frac{x\partial_y - y\partial_x}{i}\right)\right] \psi(x,y,z)$$

A transformação unitária infinitesimal tem a forma:

$$1 - i\delta\theta\, \hat{G}_z \quad ,$$

onde $\hat{G}_z$ é o <u>gerador infinitesimal</u>, neste caso

$$G_z = \frac{x(-i\hbar\partial_y) - y(-i\hbar\partial_x)}{\hbar} = \frac{x p_y - y p_x}{\hbar}$$

$$\hat{G}_z = \frac{1}{\hbar}\hat{L}_z \quad ,$$

é identificado com a componente $\underset{\sim}{z}$ (em unidades de $\hbar$) do momentum angular.

No caso mais geral de ter uma rotação em relação a um eixo arbitrário, orientado positivamente na direção do vetor unitário $\underset{\sim}{n}$, e com ângulo $\delta\theta$ (infinitesimal), temos:

$$\mathscr{D}(\hat{n},\delta\theta) = 1 - i\,\frac{\underset{\sim}{L}\cdot\hat{\underset{\sim}{n}}}{\hbar}\,\delta\theta$$

Esta forma do operador unitário infinitesimal pode ser usada para uma definição <u>mais geral</u> do operador de momentum angular. Usaremos neste caso a notação $\underset{\sim}{J}$:

$$\boxed{\mathscr{D}(\hat{n},\delta\theta) = 1 - i\,\frac{\underset{\sim}{J}\cdot\hat{n}}{\hbar}\,\delta\theta} \qquad (4)$$

Assim $\underset{\sim}{J}$ é definido como o gerador infinitesimal de rotações e <u>não</u> como

$$\underset{\sim}{L} = \underset{\sim}{r}\times\underset{\sim}{p}$$

A transformação unitária finita pode ser obtida por iteração. Escrevemos

$$\delta\theta = \frac{\theta}{N} \quad , \text{com } N \to \infty ,$$

§ Transformação canônica para uma rotação infinitesimal

Procuramos uma TC do tipo:

$$F_2(q,P) = \sum_i q_i P_i + \varepsilon G(q,P)$$

com a transformação de coordenadas canônicas

$$Q_i = q_i + \delta q_i \quad , \quad P_i = p_i + \delta p_i \quad , \qquad i = 1,2,3\ldots,n$$

As outras coordenadas são dadas por (em 1ª ordem em ε):

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}(q,P) \Rightarrow P_i \cong p_i - \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}(q,p)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G(q,P)}{\partial P_i} \Rightarrow Q_i \cong q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}(q,p)$$

Seja agora uma rotação infinitesimal com ângulo $\delta\theta$ em torno do eixo z:

$$\begin{cases} X_i = x_i - \delta\theta\, y_i \\ Y_i = y_i + \delta\theta\, x_i & , \ i = 1,2,\ldots,N \\ Z_i = z_i & \text{para } N \text{ partículas} \end{cases}$$

Identificamos ε com $\delta\theta$ (parâmetro sobre o qual há continuidade).
Assim temos:

$$\delta x_i = -\delta\theta\, y_i \quad , \qquad \delta y_i = \delta\theta\, x_i \quad , \qquad \delta z_i = 0$$

$$= \delta\theta \frac{\partial G}{\partial p_{x_i}} \qquad\qquad = \delta\theta \frac{\partial G}{\partial p_{y_i}} \qquad\qquad = \delta\theta \frac{\partial G}{\partial p_{z_i}}$$

A integração fornece:

$$G = \sum_i \left(x_i p_{y_i} - y_i p_{x_i} \right) \quad \text{como solução}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} L_{z_i} = L_z \quad , \text{momentum angular total}$$

$$\boxed{F_2(q,P) = \text{Identidade} + \delta\theta\, L_z}$$

e

$$\mathcal{D}(\hat{n},\theta) = \lim_{N\to\infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\theta}{N}(\underset{\sim}{J}\cdot\hat{n})\right]^N$$

$$\equiv \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\underset{\sim}{J}\cdot\hat{n})\right\}, \qquad (5)$$

que é manifestamente unitária.

▲ ESTRUTURA de GRUPO

Postulamos para os operadores $\mathcal{D}(R)$ a mesma estrutura de grupo que para as rotações R:

i) Elemento idêntico: 1

$$\mathcal{D}(R)\cdot 1 = 1\cdot\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(R), \ \forall R$$

ii) multiplicação:

$$R_1 R_2 = R_3 \implies \mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_1R_2) = \mathcal{D}(R_3)$$

iii) inverso

$$R\cdot R^{-1} = R^{-1}\cdot R = 1 \implies \mathcal{D}(R)\mathcal{D}^{-1}(R) = \mathcal{D}^{-1}(R)\mathcal{D}(R) = 1$$

com $\mathcal{D}^{-1}(R) = \mathcal{D}(R^{-1})$

iv) Associatividade

$$R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3 = R_1R_2R_3 \implies \mathcal{D}(R_1)\left[\mathcal{D}(R_2)\mathcal{D}(R_3)\right] =$$

$$= \left[\mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) \right] \mathcal{D}(R_3) = \mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) \mathcal{D}(R_3)$$

▶ __Af__. As rotações formam um grupo __não-abeliano__ (ou não-comutativo).

__Exemplo__: Compor rotações infinitesimais (mas não muito) em relação à eixos diferentes.

Sabemos que:

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\operatorname{sen}\theta & 0 \\ \operatorname{sen}\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

As rotações $R_x(\theta)$ e $R_y(\theta)$ em relação aos outros eixos são obtidas mudando ciclicamente as coordenadas

$$x \longrightarrow y \longrightarrow z \longrightarrow x \cdots$$

$$\begin{tikzcd} & x \arrow[dr] & \\ z \arrow[ur] & & y \arrow[ll] \end{tikzcd}$$

$$R_z(\theta) \begin{cases} x' = x\cos\theta - y\operatorname{sen}\theta \\ y' = x\operatorname{sen}\theta + y\cos\theta \\ z' = z \end{cases} , \quad R_x(\theta) \begin{cases} y' = y\cos\theta - z\operatorname{sen}\theta \\ z' = y\operatorname{sen}\theta + z\cos\theta \\ x' = x \end{cases}$$

$$R_y(\theta) \begin{cases} z' = z\cos\theta - x\operatorname{sen}\theta \\ x' = z\operatorname{sen}\theta + x\cos\theta \\ y' = y \end{cases}$$

obtendo-se as seguintes matrizes:

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\operatorname{sen}\theta \\ 0 & \operatorname{sen}\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \operatorname{sen}\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\operatorname{sen}\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

As rotações infinitesimais até ordem θ^2 são:

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\frac{\theta^2}{2} & -\theta \\ 0 & \theta & 1-\frac{\theta^2}{2} \end{pmatrix}, \quad R_y(\theta) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\theta^2}{2} & 0 & \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\theta & 0 & 1-\frac{\theta^2}{2} \end{pmatrix}$$

e

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\theta^2}{2} & -\theta & 0 \\ \theta & 1-\frac{\theta^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Assim pois calculemos $R_x(\theta) R_y(\theta)$, até 2ª ordem em θ:

$$R_x(\theta) R_y(\theta) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\theta^2}{2} & 0 & \theta \\ \theta^2 & 1-\frac{\theta^2}{2} & -\theta \\ -\theta & \theta & 1-\theta^2 \end{pmatrix}$$

e comutando as rotações:

$$R_y(\theta) R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\theta^2}{2} & \theta^2 & \theta \\ 0 & 1-\frac{\theta^2}{2} & -\theta \\ -\theta & \theta & 1-\theta^2 \end{pmatrix}$$

Obtemos o comutador:

$$R_x(\theta) R_y(\theta) - R_y(\theta) R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & -\theta^2 & 0 \\ \theta^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -\theta^2 & 0 \\ \theta^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathbb{1}$$

$$= R_z(\theta^2) - \mathbb{1}$$

Obtemos a relaçaõ:

$$[R_x(\theta), R_y(\theta)] = R_x(\theta) R_y(\theta) - R_y(\theta) R_x(\theta)$$
$$= R_z(\theta^2) - \mathbb{1} \, ,$$

até 2ª ordem em Θ. Esta relaçaõ pode agora ser traduzida para os $\mathcal{D}(R)$, usando as propriedades de grupo:

isto é :

$$\left(1-\frac{i}{\hbar}\theta J_x-\frac{\theta^2}{2\hbar^2}J_x^{\,2}\right)\left(1-\frac{i}{\hbar}\theta J_y-\frac{\theta^2}{2\hbar^2}J_y^{\,2}\right)-$$

$$-\left(1-\frac{i}{\hbar}\theta J_y-\frac{\theta^2}{2\hbar^2}J_y^{\,2}\right)\left(1-\frac{i}{\hbar}\theta J_x-\frac{\theta^2}{2\hbar^2}J_x^{\,2}\right)$$

$$=\quad 1-\frac{i}{\hbar}\theta^2 J_z-1\;=\;-\frac{i}{\hbar}\theta^2 J_z$$

$$=\cancel{1}-\cancel{\frac{i}{\hbar}\theta\left(J_x+J_y\right)}\quad-\frac{\theta^2}{\hbar^2}J_xJ_y-\cancel{\frac{\theta^2}{2\hbar^2}\left(J_x^{\,2}+J_y^{\,2}\right)}$$

$$-\left\{\cancel{1}-\frac{i}{\hbar}\theta\,\cancel{\left(J_x+J_y\right)}-\frac{\theta^2}{\hbar}J_yJ_x-\cancel{\frac{\theta^2}{2\hbar^2}\left(J_y^{\,2}+J_x^{\,2}\right)}\right\}$$

$$=\quad-\frac{\theta^2}{\hbar^2}\left(J_xJ_y-J_yJ_x\right)=-\frac{\theta^2}{\hbar^2}\left[J_x,J_y\right]$$

Resultado:

$$\left[J_x,J_y\right]=i\hbar\,J_z$$

Obtemos a álgebra de momentum angular. Permutando ciclicamente as coordenadas

$$\left[J_m,J_n\right]=i\hbar\,\epsilon_{mnk}\,J_k\,,\qquad (6)$$

A álgebra de momentum angular é conseqüência do fato que J é o gerador infinitesimal do grupo de rotações.

obtemos as relações fundamentais de comutação do momentum angular.

A definição anterior de momentum angular, cobre também o caso do spin, num espaço de dimensão 2. Os operadores definidos por:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right) ,$$

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

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|\right) ,$$

satisfazem as relações de comutação (6).

Consideremos o caso de uma rotação com eixo $\underline{z}$ e ângulo ϕ:

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\phi\, S_z\right)$$

Para estudar o efeito deste operador de rotação consideremos seu efeito nos valores esperados do spin:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle_R \equiv \mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle$$

$$\langle S_x\rangle \longrightarrow {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = \langle\alpha|\mathcal{D}_z^{+}(\phi)S_x\mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle$$

Precisamos calcular:

$$\mathcal{D}_z^\dagger(\phi)\, S_x\, \mathcal{D}_z(\phi) =$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right) S_x \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right)$$

Usamos a identidade útil:

$$\exp(i\lambda G) A \exp(-i\lambda G) = A + i\lambda\, [G, A] +$$

$$+ \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right)\left[G, [G, A]\right] \cdots$$

$$\cdots + \left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right)\left[G, [G, \ldots [G, A]] \ldots\right] + \cdots ,$$

o que significa que temos que calcular os comutadores sucessivos dos operadores de momentum angular. Tomar no nosso caso

$$G = S_z, \quad \lambda = \frac{\phi}{\hbar}, \quad A = S_x$$

Assim: $[G, A] = [S_z, S_x] = i\hbar S_y$

termos ímpares

$$[G, [G, A]] = [S_z, i\hbar S_y] = i\hbar(-i\hbar S_x) = \hbar^2 S_x$$

Termos pares

$$[G, [G, [G, A]]] = [S_z, \hbar^2 S_x] = i\hbar^3 S_y$$

$$[G, [G, [G, [G, A]]]] = [S_z, i\hbar^3 S_y] = i\hbar^3(-i\hbar) S_x = \hbar^4 S_x$$

a série completa fica:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right) S_x \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right) = S_x + i^2\phi S_y -$$

$$- \frac{1}{2!}\frac{\phi^2}{\hbar^2}\hbar^2 S_x - \frac{i^2}{3!}\frac{\phi^3}{\hbar^3}\cdot\hbar^3 S_y + \frac{1}{4!}\frac{\phi^4}{\hbar^4}\hbar^4 S_x \cdots$$

$$= S_x\left(1 - \frac{1}{2!}\phi^2 + \frac{1}{4!}\phi^4 \cdots\right) - S_y\left(\phi - \frac{1}{3!}\phi^3 \cdots\right)$$

$$= S_x \cos\phi - S_y \,\mathrm{sen}\,\phi \quad ,$$

e para o valor esperado:

$$\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle \longrightarrow {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = \langle S_x\rangle\cos\phi - \langle S_y\rangle\,\mathrm{sen}\,\phi \,.$$

Da mesma maneira, podemos verificar que:

$$\langle S_y\rangle \longrightarrow \langle S_x\rangle\,\mathrm{sen}\,\phi + \langle S_y\rangle\cos\phi$$

S_z comuta com $\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right)$, assim temos

$$\langle S_z\rangle \longrightarrow \langle S_z\rangle$$

Isto é, baixo $\mathcal{D}_z(\phi)$, os valores esperados verificam as fórmulas de transformação:

$$\begin{cases} \langle S_x \rangle' = \langle S_x \rangle \cos\phi - \langle S_y \rangle \operatorname{sen}\phi \,, \\ \langle S_y \rangle' = \langle S_x \rangle \operatorname{sen}\phi + \langle S_y \rangle \cos\phi \,, \\ \langle S_z \rangle' = \langle S_z \rangle \,, \end{cases}$$

que são as mesmas leis de transformação de vetores no espaço tridimensional. Em outras palavras, o valor esperado $\langle \underset{\sim}{S} \rangle$ do spin se comporta como um vetor clássico sob uma rotação. Isto representa uma propriedade geral do momentum angular, não é um resultado apenas restrito a $s = \frac{1}{2}$. Em geral temos:

$$\langle J_m \rangle' = \sum_{n=x,y,z} R_{mn} \langle J_n \rangle \,, \qquad m = x, y, z$$

onde R_{mn} são os elementos de matriz da rotação R de (3×3).

Pesquizar agora a ação de $\mathcal{D}_z(\phi)$ sobre um ket $|\alpha\rangle$ particular. Usando a base $(|+\rangle, |-\rangle)$ temos:

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle$$

$$\mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\phi S_z\right)|\alpha\rangle$$

Lembrar que $\quad S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$

$$S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \,,$$

portanto:

R/4

$$\mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle = \langle +|\alpha\rangle\, e^{-\frac{i\phi}{2}}|+\rangle + \langle -|\alpha\rangle\, e^{\frac{i\phi}{2}}|-\rangle$$

O fato de aparecer o ângulo meio conduz à resultados importantes.

Rotação com $\phi = 2\pi$:

$$\mathcal{D}_z(2\pi)|\alpha\rangle = e^{-i\pi}|+\rangle\langle +|\alpha\rangle + e^{i\pi}|-\rangle\langle -|\alpha\rangle$$

$$= -|\alpha\rangle$$

Isto é o ket $|\alpha\rangle$ rodado em 2π muda de sinal!!!
Só obtemos a identidade com uma rotação em 4π (720°)
No valor esperado este efeito não aparece, pois

$$\langle S_x\rangle' = {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = (-1)^2\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle = \langle S_x\rangle .$$

Fica ainda sem resposta a pergunta se este efeito pode ser detetado.

?

§ Relações de Comutação e operadores escadas

Da definição de $\vec{J}$ como gerador infinitesimal das rotações seguem as relações fundamentais de comutação:

$$(*) \qquad [J_\ell, J_m] = i\hbar\, \varepsilon_{\ell m k} J_k \,, \quad k, \ell, m = x, y, z$$

A partir daí podemos derivar outras propriedades:

I. O operador $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ comuta com todas as componentes de $\vec{J}$. Exemplo:

$$[J^2, J_z] = [J_x^2, J_z] + [J_y^2, J_z]$$

$$= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + [J_y, J_z] J_y + J_y [J_y, J_z]$$

$$= -i\hbar J_x J_y - i\hbar J_y J_x + i\hbar J_x J_y + i\hbar J_y J_x = 0$$

Em geral:

$$[J^2, J_k] = 0 \,, \quad k = x, y, z$$

II. J^2 e uma das componentes de $\vec{J}$ podem ser diagonalizadas simultaneamente. Mas não todas, porque elas não comutam entre si (ver $(*)$). Seja esta componente J_z e sejam $|a,b\rangle$ os kets autoestados

$$J^2 |a,b\rangle = a\, |a,b\rangle$$
$$J_z |a,b\rangle = b\, |a,b\rangle$$

Precisamos determinar os autovalores (a,b).

III. Introduzimos os operadores auxiliares $J_\pm$:

▸ **Def.** Operadores Escadas $J_\pm$

$$\boxed{J_\pm \equiv J_x \pm i J_y}$$

Verificamos que eles satisfazem as seguintes relações de Comutação

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

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

As propriedades de $J_\pm$ se asemelham muito com as dos operadores (a, a^+) do oscilador harmônico. A partir de I tem que

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

de maneira que $J_\pm$ não mudam o autovalor $\underline{a}$.

IV. Significado de $J_\pm$

O que é $J_\pm |a,b\rangle$? Aplicar J^2 e J_z

$$J^2 (J_\pm |a,b\rangle) = J_\pm (J^2 |a,b\rangle) = a (J_\pm |a,b\rangle)$$

$$J_\pm |a,b\rangle \longrightarrow \text{autovalor } a \text{ para } J^2$$

$$J_z (J_\pm |a,b\rangle) = (J_\pm J_z \pm \hbar J_\pm) |a,b\rangle$$

$$= (b \pm \hbar) (J_\pm |a,b\rangle)$$

$$J_\pm |a,b\rangle \longrightarrow \text{autovalor } (b \pm \hbar) \text{ para } J_z$$

Resumindo, escrevemos:

$$J_\pm |a,b\rangle = c_\pm |a, b\pm\hbar\rangle$$

V Autovalores de J^2 e J_z:
Para um dado $\underline{a}$, existe um limite superior para b

$$a \geq b^2$$

Notar que:

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

$$= \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+), \text{ forma positiva definida.}$$

Assim: $\langle a,b|(J^2 - J_z^2)|a,b\rangle = \frac{1}{2}\langle a,b|(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+)|a$

Ver que $\langle a,b| J_+ J_+^\dagger |a,b\rangle = \langle \psi|\psi\rangle \geq 0$

com $|\psi\rangle = J_+^\dagger |ab\rangle$. Assim também $\langle ab| J_+^\dagger J_+ |ab\rangle$

Logo: $\langle ab|(J^2 - J_z^2)|ab\rangle = (a - b^2)\langle ab|ab\rangle$

$$= (a-b^2) = \frac{1}{2}\langle ab|(J_+ J_- + J_- J_+)|ab\rangle \geq 0$$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{a \geq b^2} \qquad (**)$$

VI Cada vez que aplicamos J_+ a um ket $|ab\rangle$, mantem o autovalor $\underline{a}$, mas acrescemos $b \to b+\hbar$. Pensemos em aplicar várias vezes o operador J_+. Necessariamente este processo não pode continuar indefinidamente pois é válida a desigualdade (**).

Portanto deve existir b_{max}, para o qual

$$J_+ |a, b_{max}\rangle = 0 ,$$

$$\Rightarrow \qquad J_- J_+ |a, b_{max}\rangle = 0 .$$

mas $\quad J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 - i (J_y J_x - J_x J_y)$

$$= (J^2 - J_z^2) - \hbar J_z .$$

De maneira que obtemos:

$$J_- J_+ |a, b_{max}\rangle = [(J^2 - J_z^2) - \hbar J_z] |a, b_{max}\rangle = 0$$

$$= [(a - b_{max}^2) - \hbar b_{max}] |a, b_{max}\rangle$$

e como supomos que $|a, b_{max}\rangle$ não é o ket nulo

$$a - b_{max}^2 - \hbar b_{max} = 0$$

ou $\qquad \boxed{a = b_{max}(b_{max} + \hbar)}$.

Da mesma maneira, podemos operar com J_-, descendo no espectro. Assim deve existir um ket $|a\, b_{min}\rangle$ tal que

$$J_- |a\, b_{min}\rangle = 0$$

Agora temos $\quad J_+ J_- |a, b_{min}\rangle = 0$. Usamos as identidades

$$J_+ J_- = (J_x + i J_y)(J_x - i J_y) = J_x^2 + J_y^2 - i [J_x, J_y]$$

$$= (J^2 - J_z^2) + \hbar J_z$$

Daí obtemos:

$$a - b_{min}^2 + \hbar\, b_{min} = 0 \Rightarrow a = b_{min}(b_{min} - \hbar),$$

mas também $\quad a = b_{max}(b_{max} + \hbar)$

Solução: $\qquad b_{min} = -\, b_{max}$

Considerando b_{max} positivo, temos o intervalo permitido

$$-b_{max} \leq b \leq b_{max}.$$

Podemos chegar ao autovalor b_{max}, aplicando $\underline{n}$ vezes J_+ a partir de $|a, b_{min}\rangle$:

$$(J_+)^n |a\, b_{min}\rangle \longrightarrow |a\, b_{max}\rangle$$

obtendo: $\qquad b_{max} = b_{min} + n\hbar = -\, b_{max} + n\hbar$

$$\boxed{b_{max} = \frac{n}{2}\hbar}$$

- Def. Usar número j:

$$j \equiv \frac{n}{2} = \frac{b_{max}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -j \leq \frac{b}{\hbar} \leq j, \\ a = \hbar^2 j(j+1). \end{cases}$$

- Def. número m:

$$m \equiv b/\hbar$$

$$\Longrightarrow \quad -j \leq m \leq j$$

Se $\underline{j}$ for inteiro, todos os valores de $\underline{m}$ são inteiros.

Se $\underline{j}$ for semi-inteiro, então $\underline{m}$ é semi-inteiro. Em todos os casos temos:

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \quad ((2j+1) \text{ valores})$$

Usamos agora a notação:

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

$$J_z\,|a\,b\rangle \longrightarrow J_z |j\,m\rangle = \hbar m\,|j\,m\rangle$$

VII <u>Elementos de matriz de $J_\pm$</u>

$$\langle jm|\,J_- J_+\,|jm\rangle = \left(\langle jm|\,J_+^\dagger\right)\left(J_+|jm\rangle\right) \geq 0$$

$$= \langle jm|\,(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z\,|jm\rangle = \hbar^2\left[j(j+1) - m^2 - m\right]$$

Agora $J_+|jm\rangle = c_+\;|j, m+1\rangle$

$$\left(\langle jm|J_+^\dagger\right)\left(J_+|jm\rangle\right) = |c_+|^2 = \hbar^2\left[j(j+1) - m^2 - m\right]$$

$$\Longrightarrow \quad |c_+|^2 = \hbar^2\left[j(j+1) - m(m+1)\right]$$

$$= \hbar^2\left[(j-m)(j+m+1)\right]$$

<u>Convenção</u>: fator de fase nulo:

$$c_+ = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

ou

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

que automaticamente se anula para $m = j$.

O mesmo procedimento pode ser feito com J_-. O resultado

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

que agora é nulo para $m=-j$. Ambas as expressões podem ser escritas de maneira compacta:

$$J_\pm\,|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\;|j,m\pm 1\rangle$$

§ Mapping de Jordan-Schwinger para o Momentum Angular

Usamos a representação do oscilador em termos de operadores de criação e destruição. Consideramos dois tipos de osciladores independentes, que chamamos 1 e 2, com operadores:

$$(a_1, a_1^\dagger) \quad \text{e} \quad (a_2, a_2^\dagger),$$

sendo que operadores de diferente tipo comutam. Introduzimos os correspondentes operadores número:

$$N_1 = a_1^\dagger a_1 \quad , \quad N_2 = a_2^\dagger a_2 \, , \qquad (1)$$

com as relações de comutação

$$[a_i, a_i^\dagger] = 1 \, , \qquad i = 1,2$$

$$[N_i, a_i] = -a_i \, , \qquad (2)$$

$$[N_i, a_i^\dagger] = a_i^\dagger \, .$$

Como N_1 e N_2 comutam, podemos considerar uma base que diagonaliza ambos operadores simultaneamente: $\{|n_1, n_2\rangle\}$, com

$$N_1|n_1,n_2\rangle = n_1|n_1,n_2\rangle, \quad N_2|n_1,n_2\rangle = n_2|n_1,n_2\rangle \qquad (3)$$

Temos as relações:

$$\begin{aligned} a_1^{+}|n_1 n_2\rangle &= \sqrt{n_1+1}\,|n_1+1, n_2\rangle, \\ a_1|n_1 n_2\rangle &= \sqrt{n_1}\,|n_1-1, n_2\rangle, \end{aligned} \qquad (4)$$

e as relações similares para (a_2, a_2^{+}). O estado do VÁCUO é definido por

$$a_1|0,0\rangle = 0, \quad a_2|0,0\rangle = 0. \qquad (5)$$

A partir do vácuo, podemos gerar qualquer estado do sistema de dois oscilador por:

$$|n_1,n_2\rangle = \frac{(a_1^{+})^{n_1}(a_2^{+})^{n_2}}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}|0,0\rangle. \qquad (6)$$

Em (6), a ordem dos operadores não importa, porque eles comutam (álgebra de bósons).

Agora definimos o mapping para Momentum Angular.

III

Def. Usamos a notação usual de Momentum Angular

(7)
$$J_+ \equiv \hbar a_1^\dagger a_2 \ , \qquad J_- = \hbar a_2^\dagger a_1 = (J_+)^\dagger ,$$
$$J_z = \frac{\hbar}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) = \frac{\hbar}{2}(N_1 - N_2).$$

Interpretação física:

As partículas de tipo 1 portam 'spin para cima' 1/2 e as partículas de tipo 2 portam 'spin 1/2 para baixo'.

A projeção total do momentum angular (J_z) é $\hbar/2$ vezes a diferença entre as partículas de spin 'up' e o número de partículas de spin 'down'.

J_+ destrói uma partícula 'down' e cria uma partícula 'up'. O resultado líquido é aumentar a projeção do Momentum Angular em $\hbar$.

É imediato que a definição (7) conduz à álgebra de Momentum Angular. Por exemplo:

$$[J_z, J_+] = \frac{\hbar^2}{2}[N_1 - N_2, a_1^\dagger a_2]$$
$$= \frac{\hbar^2}{2}\left\{[N_1, a_1^\dagger]a_2 - a_1^\dagger[N_2, a_2]\right\} = \frac{\hbar^2}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_2) = \hbar J_+$$

IV

Obtemos (de maneira similar para J_-):

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

Agora:

$$[J_+, J_-] = \hbar^2 [a_1^+ a_2 \, , a_2^+ a_1] =$$

$$= \hbar^2 \{ [a_1^+, a_2^+ a_1] a_2 + a_1^+ [a_2, a_2^+ a_1] \}$$

$$= \hbar^2 (-a_2^+ a_2 + a_1^+ a_1) = 2\hbar J_z .$$

Também

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

$$= \frac{\hbar^2}{4} (N_1 - N_2)^2 + \frac{1}{2} \hbar^2 (a_1^+ a_2 a_2^+ a_1 + a_2^+ a_1 a_1^+ a_2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} (N_1 - N_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} [N_1 (1 + N_2) + N_2 (1 + N_1)]$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} [(N_1 - N_2)^2 + 4 N_1 N_2] + \frac{\hbar^2}{2} (N_1 + N_2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} (N_1 + N_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} (N_1 + N_2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} (N_1 + N_2) [(N_1 + N_2) + 2]$$

$$= \hbar^2 \left(\frac{N_1 + N_2}{2} \right) \left[\frac{1}{2} (N_1 + N_2) + 1 \right]$$

Com esse resultado, podemos definir o número 'j' do momentum angular total:

$$j \equiv \frac{n_1 + n_2}{2},$$

de maneira que J^2 tem autovalores

$$J^2 |n_1, n_2\rangle = \hbar^2 j(j+1) |n_1, n_2\rangle.$$

Da mesma forma podemos definir o número 'm' para a projeção J_z

$$m \equiv \frac{n_1 - n_2}{2},$$

com $$J_z |n_1, n_2\rangle = \hbar m |n_1, n_2\rangle.$$

Obtemos as relações

$$n_1 = j + m, \quad n_2 = j - m$$

Vejamos a ação dos operadores escada:

$$J_+ |n_1, n_2\rangle = \hbar a_1^\dagger a_2 |n_1 n_2\rangle = \hbar \sqrt{n_2(n_1+1)} |n_1+1, n_2-1\rangle$$

$$J_- |n_1 n_2\rangle = \hbar a_2^\dagger a_1 |n_1 n_2\rangle = \hbar \sqrt{n_1(n_2+1)} |n_1-1, n_2+1\rangle$$

Resulta claro que podemos rotular os kets $|n_1, n_2\rangle$ com os números (j, m). Fazemos agora a substituição:

$$|n_1 n_2\rangle \longrightarrow |jm\rangle,$$

onde resulta que

$$|jm\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}|0\rangle,$$

onde usamos $|0\rangle$ para o vácuo $|0,0\rangle$. A álgebra agora fica:

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

$$J_z|jm\rangle = \hbar m\,|jm\rangle,$$

e traducindo as expressões dos operadores escadas

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

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

Em particular, o estado de máximo 'm', $m=j$, é dado por

$$|j, j\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle,$$

que intuitivamente interpretamos como $2j$ partículas de spin $\frac{1}{2}$, todas com spin 'up'.

Similarmente:

$$|j,-j\rangle = \frac{(a_2^+)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}\,|0\rangle ,$$

que representa um estado formado por $2j$ partículas de spin $1/2$, todas as partículas com spin 'down'.

Nesta representação, spin $1/2$ (momentum angular $j=1/2$) aparece como fundamental, sendo que a partir desse ponto, podemos construir representações de momentum angular arbitrário. Note que, para uma representação de um dado 'j', o número de bósons é constante, com

$$n_1 + n_2 = 2j.$$

Para o caso de $j=1/2$ (spin), obtemos a relação de

$$n_1 + n_2 = 1 ,$$

com kets $|1,0\rangle$ e $|0,1\rangle$ $\longrightarrow$ dim 2

$$\left.\begin{aligned} |1,0\rangle &\longrightarrow |1/2, 1/2\rangle = |+\rangle \\ |0,1\rangle &\longrightarrow |1/2, -1/2\rangle = |-\rangle \end{aligned}\right\} \text{1-partícula}$$

com $\qquad J_z \rightarrow S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle,$

$$S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle.$$

$$S_+|+\rangle = 0, \quad S_+|-\rangle = \hbar|+\rangle,$$

$$S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle, \quad S_-|-\rangle = 0,$$

com matrizes:

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_+ \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\hbar,$$

$$S_- \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

com matrizes de Pauli:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}.$$