

Propriedades gerais de momento angular na mecânica quântica

- **Realidade experimental:** *o momento magnético de átomos, medido em qualquer direção, é quantizado. Isso significa que o momento angular, que é proporcional ao momento magnético, também é quantizado. A realidade experimental mostra que as diferenças entre valores possíveis de momento angular (orbital, spin ou de um modo geral da composição orbital+spin), em qualquer direção, são múltiplos de \hbar .*
 - Neste capítulo desenvolveremos o formalismo quântico do momento angular que descreve essa realidade experimental.
 - O formalismo vai contextualizar e mostrar a relevância do momento angular na descrição de espectros atômicos, moleculares e nucleares; vai permitir uma visão mais completa sobre spin; e vai criar condições para estudar propriedades magnéticas (efeito Zeeman entre elas).
- Começaremos com momento angular na mecânica clássica ($\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p}$).

Sabemos que $\frac{d\vec{\mathcal{L}}}{dt} = \vec{\tau}$ (torque externo) e que na ausência de forças externas

$\frac{d\vec{\mathcal{L}}}{dt} = 0 \rightarrow \vec{\mathcal{L}}$ é dita uma constante de movimento (não muda com o tempo).

- Isso também vale para forças centrais $\vec{F} \parallel \vec{r}$, pois nesse caso $\vec{\tau} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$.

Nestas condições o movimento fica restrito ao plano definido por \vec{p} e \vec{F} .

Do momento angular clássico para o quântico

- Como ficam essas propriedades na Mecânica Quântica? (Chamo a atenção que restringir o movimento da partícula à um plano parece violar a relação de incerteza na direção \perp ao plano).

- Podemos a partir da quantidade física clássica, obter a observável quântica, isto é $\vec{\mathcal{L}}(\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y, \mathcal{L}_z) \rightarrow \vec{L}(L_x, L_y, L_z)$ (operador da mecânica quântica).

- O passo seguinte é tentar responder:
 - (1) Por que o espectro de L_i é discreto?
 - (2) Quanto vale $[L_i, L_j]$? Consequências?
 - (3) Em que situação $[H, L_j] = 0$?
 - (4) E o spin (sem análogo clássico)?

- Usaremos a seguinte nomenclatura
 - momento angular orbital $\rightarrow \vec{L}$
 - momento angular intrínseco $\rightarrow \vec{S}$
 - momento angular total $\rightarrow \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

- Algumas vezes, para facilitar, usaremos \vec{J} com caráter geral: pode ser \vec{S} , \vec{L} ou a soma de \vec{S}' s, ou a soma de \vec{L}' s ou de \vec{S}' s, e \vec{L}' s.

Relações de comutação características de momento angular

- Momento angular orbital $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ e as consequências de $[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

As componentes misturam componentes de \vec{R} e de \vec{P} , que nem sempre comutam entre si. Será que precisamos simetrizar para obter operadores Hermiteanos?

- De fato, não é preciso simetrizar, pois as componentes de \vec{r} e \vec{p} que compõem

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{pmatrix} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x),$$

estão em dimensões distintas, e o δ_{ij} presente no comutador é sempre zero.

$$\therefore (YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z, XP_y - YP_x)^\dagger = (YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z, XP_y - YP_x),$$

uma vez que $(YP_z - ZP_y)^\dagger = P_z Y - P_y Z = YP_z - ZP_y$, etc.

Assim temos que $\vec{L} = \vec{L}^\dagger$ é um operador Hermiteano (não exige simetrização).

- E as componentes, comutam entre si? Para verificar isso calcule

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] = [YP_z, ZP_x] - \underbrace{[YP_z, XP_z]}_0 - \underbrace{[ZP_y, ZP_x]}_0 + [ZP_y, XP_z],$$

$$\text{tal que } [L_x, L_y] = Y \underbrace{[P_z, Z]}_{-i\hbar} P_x + X \underbrace{[Z, P_z]}_{+i\hbar} P_y = i\hbar(XP_y - YP_x) = i\hbar L_z$$

De forma semelhante, mostre que $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$ e $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$.

Generalização para um sistema de partículas

- Considere o momento angular total (escrito no referencial \mathcal{O}) de um sistema de N partículas, dado na mecânica clássica por $\vec{\mathcal{L}} = \sum_i^N \vec{\mathcal{L}}_i$. Não é difícil mostrar que se tomarmos que a contribuição de cada partícula é $\vec{L}_i = \vec{R}_i \times \vec{P}_i$, vai valer $[L_x, L_y] = i\hbar L_z \dots$, se considerarmos que $[L_{ix}, L_{jy}] = i\hbar L_{iz} \delta_{ij} \dots$
- Assim escreveremos, de forma geral, que as componentes de momento angular

satisfazem as regras de comutação:
$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases} \Rightarrow [J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

onde
$$\begin{cases} \epsilon_{ijk} = 0 \rightarrow \text{dois ou mais índices iguais,} \\ \epsilon_{ijk} = 1 \rightarrow \text{rotações cíclicas de } \epsilon_{123}, \\ \epsilon_{ijk} = -1 \rightarrow \forall \text{ trocas não cíclicas de } \epsilon_{123}. \end{cases}$$

- As componentes de \vec{J} não comutam entre si.
- A boa notícia é que $J^2 = \vec{J} \cdot \vec{J} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ comuta com todas as componentes, pois o que vale para $[J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] = [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] = J_y [J_y, J_x] + [J_y, J_x] J_y + J_z [J_z, J_x] + [J_z, J_x] J_z = -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y + i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z = 0$, vale também para as outras componentes, isto é: $[J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0$.

Relações de comutação das componentes de momento angular

- O que significam essas relações de não comutação? (1) J_x , J_y e J_z não podem ser medidos simultaneamente, (2) a medida de um “estraga” a medida do outro e (3) complicam de certa forma a previsão do futuro das medidas de observáveis deste tipo.
- Entretanto, o fato de todas as componentes de \vec{J} comutarem com J^2 , permite escolher uma delas e formar um par de observáveis que comutam. Se tal par comutar com a Hamiltoniana, talvez seja possível formar um CCOC e explorar situações onde o momento angular total e uma de suas projeções sejam bons números quânticos. Veremos em que circunstâncias isso é possível.
- No caso de uma partícula sujeita uma força central, veremos que H, L^2 e L_z

respeitam as relações
$$\begin{cases} [H, L^2] = 0 \\ [H, L_z] = 0 \\ [L^2, L_z] = 0 \end{cases}$$
 e podem formar um CCOC, assim como

H, L^2 e L_x ou H, L^2 e L_y . Todos juntos, entretanto, não formam um CCOC, uma vez que $[L_i, L_j] = i\hbar L_k \epsilon_{ijk}$. De um modo geral, elegemos L_z como a componente de \vec{L} de nosso CCOC. Antes de prosseguir nesse assunto, veremos que as relações de comutação das componentes de momento angular, por si só, definem o espectro de L^2 e L_z , conforme a realidade experimental.

Relações de comutação e o espectro de momento angular

Teoria geral de momento angular

- Definições e notações.

- Definiremos dois novos operadores, J_+ e J_- por:
$$\begin{cases} J_+ \equiv J_x + iJ_y \\ J_- \equiv J_x - iJ_y \end{cases}$$

- Note que não são operadores Hermiteanos, pois $J_+^\dagger = J_-$ e $J_-^\dagger = J_+$.

- Daqui para frente trabalharemos com $\{J^2, J_z, J_+, J_-\}$ no lugar de $\{J^2, J_z, J_x, J_y\}$.

- Note que $[J^2, J_z] = [J^2, J_+] = [J^2, J_-] = 0$ e que

$$[J_z, J_+] = [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y - i^2\hbar J_x = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+$$

$$[J_z, J_-] = [J_z, J_x - iJ_y] = [J_z, J_x] - i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i^2\hbar J_x = -\hbar(J_x - iJ_y) = -\hbar J_-$$

$$J_+ J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z.$$

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z.$$

- As duas últimas expressões somadas, fornecem $J^2 = J_z^2 + \frac{J_+ J_- + J_- J_+}{2}$.

Relações de comutação e o espectro de momento angular

F689

Aula 22

- Notação para os autovalores de J^2 e J_z
- O que devemos esperar de $\langle \psi | J^2 | \psi \rangle$? Sabemos que como J_i é Hermiteano,
$$\langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \langle \psi | J_x^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_y^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle = \|J_x|\psi\rangle\|^2 + \|J_y|\psi\rangle\|^2 + \|J_z|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$
- Por convenção, adotaremos $J^2|\psi\rangle = j(j+1)\hbar^2|\psi\rangle$, com $j \geq 0$ e uso de \hbar (dimensão de momento angular). A forma do autovalor parece inusitada. Se fosse $\lambda\hbar^2$, com a exigência $\lambda \geq 0$, seria natural. Note, entretanto, que a condição $j(j+1) = \lambda$ não é restritiva, pois $j^2 + j - \lambda = 0 \Rightarrow$ com discriminante $\Delta = 1 + 4\lambda$, fornece duas raízes para $\lambda \geq 0$, $j = \frac{-1 \pm \sqrt{1+4\lambda}}{2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{uma sempre positiva começando do zero, e} \\ \text{outra sempre negativa começando do zero.} \end{array} \right.$
- Também, por convenção, adotaremos $J_z|\psi\rangle = m\hbar|\psi\rangle$ e para $|\psi\rangle$, o autoket de J^2 e J_z , usaremos a notação $|\psi\rangle = |k, j, m\rangle$, onde k representa tudo que falta para $\{J^2, J_z\}$ formar um CCOC.

Sobre os autovalores de $J^2 \rightarrow j(j+1)\hbar^2$, com $j \geq 0$ e de $J_z \rightarrow m\hbar$.

- *Lema 1:* $-j \leq m \leq j$
- Para provar, considere que $\|J_+|\psi\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_- J_+ | k, j, m \rangle \geq 0$ e \therefore
$$\langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | k, j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \geq 0$$

$$\hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) = \hbar^2 (j-m)(j+m+1) \geq 0 \text{ (caso 1)}$$

Relações de comutação e o espectro de momento angular

○ Poderíamos ter começado por $\|J_-|\psi\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_+ J_- | k, j, m \rangle \geq 0$ e \therefore

$$\langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) | k, j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \geq 0$$

$$\hbar^2 (j(j+1) + m(-m+1)) = \hbar^2 (j+m)(j-m+1) \geq 0 \text{ (caso 2)}$$

○ Precisamos conciliar $\begin{cases} \text{caso 1: } (j-m)(j+m+1) \geq 0 \\ \text{caso 2: } (j+m)(j-m+1) \geq 0 \end{cases}$

○ **caso 1** $\begin{cases} j-m \geq 0 \text{ e } (j+m+1) \geq 0 \\ j-m \leq 0 \text{ e } (j+m+1) \leq 0 \end{cases} \begin{cases} m \leq j \\ m \geq -j-1 \end{cases} \Rightarrow -(j+1) \leq m \leq j$
impossível, pois $j \geq 0$

$\begin{cases} j-m \leq 0 \text{ e } (j+m+1) \leq 0 \\ j+m \geq 0 \text{ e } (j-m+1) \geq 0 \end{cases} \begin{cases} m \geq j \\ m \leq -j-1 \end{cases} \Rightarrow \overbrace{j \leq m \leq -(j+1)}$

○ **caso 2** $\begin{cases} j+m \geq 0 \text{ e } (j-m+1) \geq 0 \\ j+m \leq 0 \text{ e } (j-m+1) \leq 0 \end{cases} \begin{cases} m \geq -j \\ m \leq j+1 \end{cases} \Rightarrow -j \leq m \leq (j+1)$
impossível, pois $j \geq 0$

$\begin{cases} j+m \leq 0 \text{ e } (j-m+1) \leq 0 \\ j+m \geq 0 \text{ e } (j-m+1) \geq 0 \end{cases} \begin{cases} m \leq -j \\ m \geq j+1 \end{cases} \Rightarrow \overbrace{m \leq -j \text{ e } m > j}$

Para satisfazer $\begin{cases} -(j+1) \leq m \leq j \\ -j \leq m \leq (j+1) \end{cases} \Rightarrow$ precisamos $-j \leq m \leq j$

Teoria geral de momento angular

• Lema 2:

(i) Se $m = -j \Rightarrow J_- |k, j, m\rangle = 0$.

(ii) Se $m > -j \Rightarrow J_- |k, j, m\rangle \neq 0$ onde $J_- |k, j, m\rangle$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m-1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{array} \right.$

◦ Demonstração de (i): a norma de um ket é positiva ou zero. Vamos começar pela norma de $J_- |k, j, m\rangle$, onde $\|J_- |k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_+ J_- |k, j, m\rangle \geq 0$. Como $J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$, podemos escrever $(j(j+1) - m^2 + m)\hbar^2 \geq 0$, o que permite escrever $(j+m)(j-m+1) \geq 0$. Em que condições que isso é

zero? $\left\{ \begin{array}{l} j+m=0 \rightarrow m=-j \text{ (se a norma é zero é porque o ket é nulo.)} \\ j-m+1=0 \rightarrow m=j+1 \text{ (impossível, pois } m \text{ está entre } -j \text{ e } j.) \end{array} \right.$

Isso permite concluir que $J_- |k, j, -j\rangle = 0$, pois $\|J_- |k, j, -j\rangle\|^2 = 0$.

É possível mostrar o caminho inverso. Se $\left\{ \begin{array}{l} |k, j, m\rangle \neq 0 \text{ e} \\ J_- |k, j, m\rangle = 0 \end{array} \right. \Rightarrow m = -j$.

Aplique J_+ em $J_- |k, j, m\rangle = 0$ e use que $J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ para obter $(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |k, j, m\rangle = \underbrace{((j(j+1) - m^2 + m) \hbar^2)}_{(j+m)(j-m+1)} |k, j, m\rangle = 0$ e como

$$(j+m)(j-m+1)$$

$|k, j, m\rangle \neq 0$ temos que $m = j+1 \rightarrow$ impossível ou $m = -j \rightarrow$ c.q.d.

Teoria geral de momento angular

(ii) Se $m > -j \Rightarrow J_- |k, j, m\rangle \neq 0$ onde $J_- |k, j, m\rangle$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m-1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{array} \right.$

○ Demonstração da parte 1: se $m > -j \Rightarrow \|J_- |k, j, m\rangle\|^2 = \underbrace{(j+m)(j-m+1)} > 0$

só é zero, se $m = -j$

Se a norma é diferente de zero, então o vetor é não nulo. Parte 1 demonstrada.

○ Para demonstrar a parte 2, considere $[J^2, J_-]|k, j, m\rangle = 0$, pois $[J^2, J_-] = 0$. Isso implica em $J^2 J_- |k, j, m\rangle = J_- J^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_- |k, j, m\rangle$, ou seja

$J_- |k, j, m\rangle$ é autoket de J^2 com autovalor $j(j+1)\hbar^2$.

Em seguida considere que $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$ e aplique em $|k, j, m\rangle$ para obter: $J_z J_- |k, j, m\rangle = J_- J_z |k, j, m\rangle - \hbar J_- |k, j, m\rangle = (m-1)\hbar J_- |k, j, m\rangle$, ou seja

$J_- |k, j, m\rangle$ é autoket de J_z com autovalor $(m-1)\hbar$.

Teoria geral de momento angular

• *Lema 3:*

(i) Se $m = j \Rightarrow J_+|k, j, m\rangle = 0$.

(ii) Se $m < j \Rightarrow J_+|k, j, m\rangle \neq 0$ onde $J_+|k, j, m\rangle$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m+1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{array} \right.$

◦ Demonstração de (i): a norma de um ket é positiva ou zero. Vamos começar pela norma de $J_+|k, j, m\rangle$, onde $\|J_+|k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m|J_-J_+|k, j, m\rangle \geq 0$. Como $J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$, podemos escrever $(j(j+1) - m^2 - m)\hbar^2 \geq 0$, o que permite escrever $(j-m)(j+m+1) \geq 0$. Em que condições que isso é

zero? $\left\{ \begin{array}{l} j - m = 0 \rightarrow m = j \text{ (se a norma é zero é porque o ket é nulo.)} \\ j + m + 1 = 0 \rightarrow m = -j - 1 \text{ (impossível, pois } m \text{ está entre } -j \text{ e } j.) \end{array} \right.$

Isso permite concluir que $J_+|k, j, +j\rangle = 0$, pois $\|J_+|k, j, +j\rangle\|^2 = 0$.

É possível mostrar o caminho inverso. Se $\left\{ \begin{array}{l} |k, j, m\rangle \neq 0 \text{ e} \\ J_+|k, j, m\rangle = 0 \end{array} \right. \Rightarrow m = +j$.

Aplique J_- em $J_+|k, j, m\rangle = 0$ e use que $J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ para obter

$$(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|k, j, m\rangle = \underbrace{((j(j+1) - m^2 - m)\hbar^2)}_{(j-m)(j+m+1)}|k, j, m\rangle = 0 \text{ e como}$$

$|k, j, m\rangle \neq 0$ temos que $m = -j - 1 \rightarrow$ impossível ou $m = +j \rightarrow$ c.q.d.

Teoria geral de momento angular

(ii) Se $m < j \Rightarrow J_+|k, j, m\rangle \neq 0$ onde $J_+|k, j, m\rangle$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{autoket de } J^2 \text{ e } J_z, \text{ com} \\ \text{autovalores } j(j+1)\hbar^2 \text{ e} \\ (m+1)\hbar, \text{ respectivamente.} \end{array} \right.$

o Demonstração da parte 1: se $m < j \Rightarrow \|J_+|k, j, m\rangle\|^2 = \underbrace{(j-m)(j+m+1)} > 0$

só é zero, se $m = +j$

Se a norma é diferente de zero, então o vetor é não nulo. Parte 1 demonstrada.

o Para demonstrar a parte 2, considere $[J^2, J_+]|k, j, m\rangle = 0$, pois $[J^2, J_+] = 0$. Isso implica em $J^2 J_+|k, j, m\rangle = J_+ J^2|k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_+|k, j, m\rangle$, ou seja

$J_+|k, j, m\rangle$ é autoket de J^2 com autovalor $j(j+1)\hbar^2$.

Em seguida considere que $[J_z, J_+] = \hbar J_+$ e aplique em $|k, j, m\rangle$ para obter: $J_z J_+|k, j, m\rangle = J_+ J_z|k, j, m\rangle + \hbar J_+|k, j, m\rangle = (m+1)\hbar J_+|k, j, m\rangle$, ou seja

$J_+|k, j, m\rangle$ é autoket de J_z com autovalor $(m+1)\hbar$.