Operador de Translação

Este operador atua em um estado $|\mathbf{r}'\rangle$ de uma partícula que se encontra em $\mathbf{r}'$ e a leva para um novo estado, agora $|\mathbf{r}'+d\mathbf{r}'\rangle$.

$$\Im(d\mathbf{r}')|\mathbf{r}'\rangle = |\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle$$

Operador de deslocamento infinitesimal

Fase igual a 1 por convenção

Note que $|\mathbf{r}'\rangle$ não é autoket de $\Im(d\mathbf{r}')$.

O efeito de $\Im(d\mathbf{r}')$ sobre $|\alpha\rangle \rightarrow \Im(d\mathbf{r}')|\alpha\rangle = \Im(d\mathbf{r}')\int d^3r'|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\alpha\rangle$

$$= \int d^3r'|\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\alpha\rangle$$

$$= \int d^3r'|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}' - d\mathbf{r}'|\alpha\rangle$$

função de onda calculada em $\mathbf{r}' - d\mathbf{r}'$

Propriedades do Operador de Translação

1) Se $|\alpha\rangle$ é normalizado $\rightarrow \Im(d\mathbf{r}')|\alpha\rangle$ também é normalizado

$$\rightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\Im^\dagger(d\mathbf{r}')\Im(d\mathbf{r}')|\alpha\rangle = 1$$

basta $\rightarrow \Im^\dagger(d\mathbf{r}')\Im(d\mathbf{r}') = 1 \Rightarrow \Im^\dagger(d\mathbf{r}') = \Im^{-1}(d\mathbf{r}')$

2) Translação primeiro em $d\mathbf{r}'$ e depois em $d\mathbf{r}''$ tem que resultar em $d\mathbf{r}' + d\mathbf{r}''$

$$\Im(d\mathbf{r}'')\Im(d\mathbf{r}') = \Im(d\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'')$$

3) $\Im(-d\mathbf{r}') = \Im^{-1}(d\mathbf{r}')$

4) $\lim_{d\mathbf{r}'\rightarrow 0} \Im(d\mathbf{r}') = 1$ neste limite basta primeira ordem em $d\mathbf{r}'$ para representar $\Im(d\mathbf{r}')$. Adotaremos $\Im(d\mathbf{r}') = 1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}'$

5) Se K_x, K_y, K_z forem operadores Hermiteanos, mostraremos que $\Im$ satisfaz as 3 primeiras propriedades

Propriedades do Operador de Translação

Adotamos $\Im(d\mathbf{r}') = 1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}'$. Esta escolha satisfaz as 3 primeiras propriedades:

1) $\Im^\dagger(d\mathbf{r}')\Im(d\mathbf{r}') = 1$

$$(1 + i\mathbf{K}^\dagger.d\mathbf{r}')(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}') = 1 + i(\mathbf{K} - \mathbf{K}).d\mathbf{r}' + \mathcal{O}^2(d\mathbf{r}') = 1 + \mathcal{O}^2(d\mathbf{r}')$$

2) $\Im(d\mathbf{r}')\Im(d\mathbf{r}'') = \Im(d\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'')$

$$(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}')(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}'') = (1 - i\mathbf{K}.(d\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'') + \mathcal{O}^2(d\mathbf{r}')$$

3) $\Im(-d\mathbf{r}') = \Im^{-1}(d\mathbf{r}')$

$$(1 - i\mathbf{K}.(-d\mathbf{r}')) = (1 + i\mathbf{K}.d\mathbf{r}') = (1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}')^\dagger = \Im^{-1}(d\mathbf{r}')$$

Uma relação interessante entre $\mathbf{K}$ e $\mathbf{R}$, pode ser obtida a partir das equações:

$$(1) \;\rightarrow \Im(d\mathbf{r}')\mathbf{R}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'\Im(d\mathbf{r}')|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'|\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle$$

$$(2) \;\rightarrow \quad \mathbf{R}\Im(d\mathbf{r}')|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{R}|\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle = (\mathbf{r}' + d\mathbf{r}')|\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle$$

Tome (2)-(1) $\rightarrow$ $[\mathbf{R}, \Im(d\mathbf{r}')]|\mathbf{r}'\rangle = d\mathbf{r}'|\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'\rangle \approx d\mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle + \mathcal{O}^2(d\mathbf{r}')$

Assim , temos para $\forall\ |\mathbf{r}'\rangle \rightarrow [\mathbf{R}, \Im(d\mathbf{r}')] = d\mathbf{r}'$

e $\therefore [\mathbf{R}, -i(\mathbf{K}.d\mathbf{r}')] = -i\mathbf{R}(\mathbf{K}.d\mathbf{r}') + i(\mathbf{K}.d\mathbf{r}')\mathbf{R} = d\mathbf{r}'$

Para $d\mathbf{r}' = dx'\hat{\mathbf{i}}$ *ou* $dy'\hat{\mathbf{j}}$ *ou* $dz'\hat{\mathbf{k}}$, *temos* $\boxed{[R_i, K_j] = i\delta_{ij}}$

Momento como Gerador de Translação

Qual o significado físico de $\mathbf{K}$? Em mecânica clássica, uma translação infinitesimal pode ser vista como uma transformação canônica do tipo

$X_{novo} \equiv X = x + dx$ e $P_{novo} \equiv P = p$ relação que pode ser obtida

da função geratriz $F_2(x,P) = xP + dxP \begin{cases} p = \frac{\partial F_2}{\partial x} = P \\ X = \frac{\partial F_2}{\partial P} = x + dx \end{cases}$

A função geratriz $F_2(x,P) = xP$ é a função geratriz da transformação identidade $X = x$ e $P = p$ $\therefore$ especula-se (ou se preferir, postula-se) que K está de alguma maneira relacionado com o momento linear

$$K = \frac{P}{\text{cte universal com dimensão de ação}}$$

dimensão de momento angular

$$\Im(d\mathbf{r}') = 1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{r}'$$

dimensão de inverso de comprimento

$$\boxed{\Im(d\mathbf{r}') = 1 - i\frac{\mathbf{P}.d\mathbf{r}'}{\hbar}}$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad \textit{mesma que a de Louis de Broglie}$$

Momento como Gerador de Translação

A relação $[R_i, K_j] = i\delta_{ij}$ fica $[R_i, \frac{P_j}{\hbar}] = i\delta_{ij} \longrightarrow [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$

e a relação de incerteza $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2,$ fica

$$\boxed{\langle(\Delta R_i)^2\rangle\langle(\Delta P_j)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}\delta_{ij}}$$

Até agora translações infinitesimais. O que muda para translações finitas?

Que tal construí-la como uma composição sucessiva de translações infinitesimais?

$\Im(\Delta r'\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{r}'\rangle = |\mathbf{r}' + \Delta r'\hat{\mathbf{r}}\rangle,$ onde na direção $\hat{\mathbf{x}},$ fica:

$$\Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \lim_{N\to\infty}(1 - \frac{iP_x\Delta x'}{N\hbar})^N = \exp\left(-\frac{iP_x\Delta x'}{\hbar}\right)$$

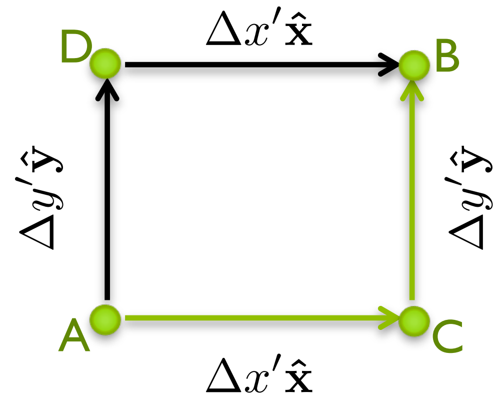
Aqui, a exponencial é função do operador $\chi = -\frac{iP_x\Delta x'}{\hbar}$ e precisa ser entendida

por $\exp(\chi) = 1 + \chi + \frac{\chi^2}{2!} + \dots$

Atenção: só P_x é operador

Momento como Gerador de Translação

Uma propriedade fundamental das translações é que translações sucessivas em direções diferentes, digamos x e y, comutam.



Cuidado!

$$\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})\Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \exp\left(-\frac{iP_y\Delta y'}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{iP_x\Delta x'}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{P_y\Delta y' + P_x\Delta x'}{\hbar}\right) =$$
$$= \Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}} + \Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})$$

$$[\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}}), \Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})] = 0 \text{ só se } \left[\exp\left(-\frac{iP_y\Delta y'}{\hbar}\right), \exp\left(-\frac{iP_x\Delta x'}{\hbar}\right)\right] = 0$$
$$\left[\left(1 - \frac{iP_y\Delta y'}{\hbar} - \frac{P_y^2\Delta y'^2}{2\hbar^2} + \dots\right), \left(1 - \frac{iP_x\Delta x'}{\hbar} - \frac{P_x^2\Delta x'^2}{2\hbar^2} + \dots\right)\right] =$$
$$= -\frac{\Delta y'}{\hbar}\frac{\Delta x'}{\hbar}[P_y, P_x] + \mathcal{O}(\Delta y')^2 \text{ ou } \mathcal{O}(\Delta x')^2 \longrightarrow \boxed{[P_y, P_x] = 0}$$

Momento como Gerador de Translação 3d

A hipótese de que as aplicações de operações de translação, em diferentes direções, comutam, implica em $[P_i, P_j] = 0$ p/ i e $j = x, y, z$. Se as componentes de $\mathbf{P}'$ comutam entre si, é possível construir $|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x, p'_y, p'_z\rangle$, de tal forma que $P_x|\mathbf{p}'\rangle = p'_x|\mathbf{p}'\rangle; \quad P_y|\mathbf{p}'\rangle = p'_y|\mathbf{p}'\rangle; \quad P_z|\mathbf{p}'\rangle = p'_z|\mathbf{p}'\rangle$

Podemos definir: $|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle$ onde $\begin{cases} p_x|\mathbf{p}'\rangle = P_x|p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle \\ p_y|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x\rangle \otimes P_y|p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle \\ p_z|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes P_z|p'_z\rangle \end{cases}$

Importante:

Note que $|\mathbf{p}'\rangle$ é autoket de $\Im(d\mathbf{r}')$,

$$\Im(d\mathbf{r}')|\mathbf{p}'\rangle = (1 - i\frac{\mathbf{P}.d\mathbf{r}'}{\hbar})|\mathbf{p}'\rangle = (1 - i\frac{\mathbf{p}'.d\mathbf{r}'}{\hbar})|\mathbf{p}'\rangle, \text{ pois } [\mathbf{P}, \Im(d\mathbf{r}')] = 0$$

$\boxed{\textit{O autovalor, entretanto, é complexo} \longrightarrow \Im(d\mathbf{r}') \textit{ não é Hermiteano}}$

Operador de Evolução Temporal

Na mecânica quântica, o tempo t é apenas um parâmetro. Não é um operador.

Em $t = t_0$, temos $|\alpha, t_0\rangle$. Entretanto, de um modo geral, em t, $|\alpha, t_0; t\rangle \neq |\alpha, t_0\rangle$.

Por definição, $\lim_{t \to t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha, t_0; t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle$.

Nossa tarefa é estudar a evolução $|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha, t_0; t\rangle$.

A busca de como o estado muda mediante o deslocamento temporal, induz a idéia de um operador $U(t, t_0)$, tal que $|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$.

Chamaremos $U(t, t_0)$ de operador de evolução temporal.

Que propriedades esperamos dele?

Propriedades do Operador de Evolução Temporal

1)Unitário. Porque? É preciso conservar a norma. Em que sentido? Que tal

Note o papel da base completa

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} C_{a'}(t_0)|a'\rangle \rightarrow \sum_{a'} |C_{a'}(t_0)|^2 = 1$$

Observe que, em geral $C_{a'}(t) \neq C_{a'}(t_0)$

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} C_{a'}(t)|a'\rangle \rightarrow \sum_{a'} |C_{a'}(t)|^2 = 1$$

Para exemplificar, considere $|S_x, +\rangle$ em um campo magnético constante na direção z. A precessão no plano xy faz com que o estado mude de $|S_x, +\rangle$ para um misto de $|S_x, +\rangle$ com $|S_x, -\rangle$ e depois só $|S_x, -\rangle$ e assim por diante. Tudo isso ocorre, mas $|\langle S_x, +|\alpha, t_0; t\rangle|^2 + |\langle S_x, -|\alpha, t_0; t\rangle|^2 = 1,$ ou ainda

$$\langle \alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = \langle \alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle = 1, \qquad \forall\ t$$

Isso é garantido com $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$

Propriedades do Operador de Evolução Temporal

2) $U(t_2, t_0) = \underbrace{U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)}_{\text{leia da direita para a esquerda}}$, onde $(t_2 > t_1 > t_0)$

3) Deslocamentos infinitesimais $U(t_0 + dt, t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle$, onde

$$\lim_{dt \to 0} U(t_0 + dt, t_0) = 1$$

4) Esperamos que o operador que ocasiona deslocamentos infinitesimais, seja em primeira ordem em dt, ou seja

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt$$

5) $\Omega^\dagger = \Omega$ é suficiente para garantir a unitaridade de $U(t_0 + dt, t_0)$ em primeira ordem em dt.

Mostre que $\begin{cases} U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1)U(t_0 + dt_1, t_0) \\ U^\dagger(t_0 + dt, t_0)U(t_0 + dt, t_0) = 1 \end{cases}$

em primeira ordem

Propriedades do Operador de Evolução Temporal

De forma similar ao que fizemos com o operador de deslocamento no espaço, buscamos ajuda na mecânica clássica. O operador clássico que causa a evolução temporal (deslocamento no tempo) é a Hamiltoniana. A proposta é

$$U(t_0+dt,t_0)=1-\frac{iHdt}{\hbar}$$

De novo, o $\hbar$ acerta as unidades. Lembre que $\hbar$ tem unidade de energia $\times$ tempo.

Poderíamos perguntar se a constante $\hbar$ do operador $\Im(dx')=1-\dfrac{iPdx'}{\hbar}$ é a mesma que aparece em $U(t_0+dt,t_0)=1-\dfrac{iHdt}{\hbar}$? Veremos que sim.

Equação de Schrödinger

A propriedade de composição de deslocamentos temporais (propriedade 2), permite escrever $U(t+dt,t_0) = U(t+dt,t)U(t,t_0) = (1 - \frac{iHdt}{\hbar})U(t,t_0)$, onde o intervalo entre t_0 e t não precisa ser infinitesimal. Reorganizando esta equação, temos

$$U(t+dt,t_0) - U(t,t_0) = -\frac{iHdt}{\hbar}U(t,t_0)$$

ou melhor

$$i\hbar\frac{U(t+dt,t_0) - U(t,t_0)}{dt} = HU(t,t_0)$$

que no limite de dt indo a zero, fornece

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0),$$

a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal.

Multiplique esta equação, pela direita, pelo ket independente de t, $|\alpha, t_0\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle = HU(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle \longrightarrow \underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle = H|\alpha,t_0;t\rangle}_{\text{equação de Schrödinger convencional}}$$

Equação de Schrödinger e o Operador de Evolução Temporal

Encontramos a forma infinitesimal para o operator de evolução temporal

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar}$$

Vimos que o operador de evolução temporal satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0), \qquad \text{com} \lim_{t\to t_0} U(t,t_0) = 1$$

Achamos também a equação de Schrödinger para o ket $|\alpha, t_0; t\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle = H|\alpha, t_0; t\rangle$$

mas como $U(t,t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0; t\rangle$, basta resolver a equação para operador de evolução temporal que teremos o futuro do ket. Dividiremos o problema em 3 casos:

1) $H(t) = H$ (Hamiltoniana não depende do tempo)

2) $[H(t), H(t')] = 0 \;\forall\; t$ e t' (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's comutam em instantes diferentes)

3) $[H(t), H(t')] \neq 0$ para $t \neq t'$ (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's não comutam em instantes diferentes)

Operador de Evolução Temporal

$1^{\underline{o}}$ **Caso:** $H(t) = H$ *(Hamiltoniana não depende do tempo)*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \rightarrow \boxed{U(t,t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]}$$

Para provar isso, substitua na equação de Schrödinger, a expansão:

$$\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = 1 + \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] + \frac{1}{2!}\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]^2 + \ldots$$

isso permite encontrar

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = i\hbar\left(\left[\frac{-iH}{\hbar}\right] + \frac{1}{2!}\left[\frac{-H^2 2(t-t_0)}{\hbar^2}\right] + \ldots\right) =$$

$$= H\left(1 + \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] + \ldots\right) = HU(t,t_0)$$

note que a solução respeita a condição de contorno $\lim_{t\to t_0} U(t,t_0) = 1$

Uma outra forma de fazer isso é tomar um número infinito de evoluções temporais infinitesimais:

$$\lim_{N\to\infty}\left[1 - \frac{(iH/\hbar)(t-t_0)}{N}\right]^N = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

Operador de Evolução Temporal

$2^{\underline{o}}$ Caso: $[H(t), H(t')] = 0 \ \forall \ \ t$ e t' (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's comutam em instantes diferentes). A solução proposta é:

$$\boxed{U(t,t_0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right]}$$

que pode ser verificada pela estratégia de expansão, como no primeiro caso. Um exemplo interessante é de uma partícula com spin em um campo magnético fixo em uma direção, mas variável no tempo em intensidade Para perceber que a forma de solução proposta tem sentido, resolva a equação para a função $w(t)$

$$i\hbar\frac{dw}{dt} = h(t)w(t) \rightarrow \frac{dw}{w} = \frac{-ih(t)dt}{\hbar} \rightarrow \int_{w(t0)}^{w(t)} \frac{dw}{w} = \int_{t_0}^{t} \frac{-ih(t)dt}{\hbar}$$

$$\ln w(t)\Big|_{w(t_0)}^{w(t)} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} h(t')dt' \rightarrow \ln w(t) - \ln w(t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} h(t')dt'$$

e encontre a forma proposta $w(t) = \exp\left[\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} h(t')dt'\right]$, pois $w(t_0) = 1$

Operador de Evolução Temporal

A importância da relação de comutação de H's em instantes diferentes, vem da propriedade $U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)=U(t_2,t_0)$ que pode ser escrita por

$$\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_1}^{t_2} dt' H(t')\right]\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t_1} dt' H(t')\right]=\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t_2} dt' H(t')\right]$$

Note que isso só é verdade se $\exp(A)\exp(B)=\exp(A+B)$, e isso exige $[A,B]=0$ (mostre isso, usando a expansão da exponencial em ambos os lados)

3$^{\underline{0}}$ Caso: $[H(t),H(t')]\neq 0$ para $t\neq t'$ (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's não comutam em instantes diferentes). A solução formal é:

$$\boxed{U(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)}$$

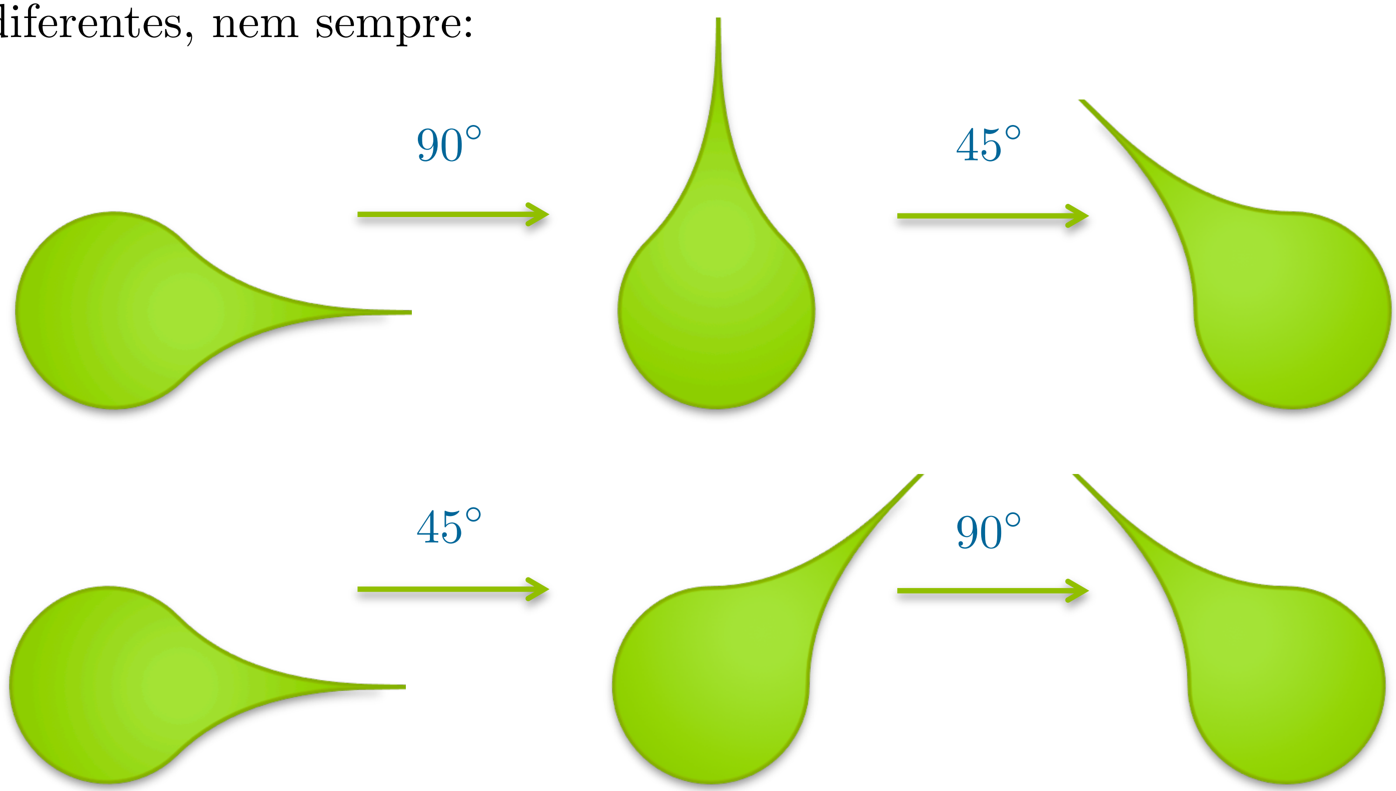
Um exemplo interessante é de uma partícula com spin em um campo magnético variável no tempo em sua direção e em intensidade.

Mostre que caso 3 respeita casos 1 e 2.

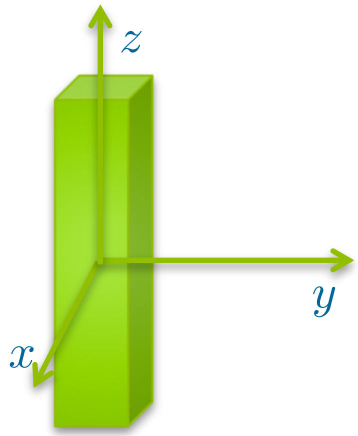
Teoria de Momento Angular

Motivação: átomos, moléculas, espectroscopia, simetrias, espalhamento, etc. Um bom começo para este assunto: (1) relacionar rotações com momento angular; e (2) relações de comutação:

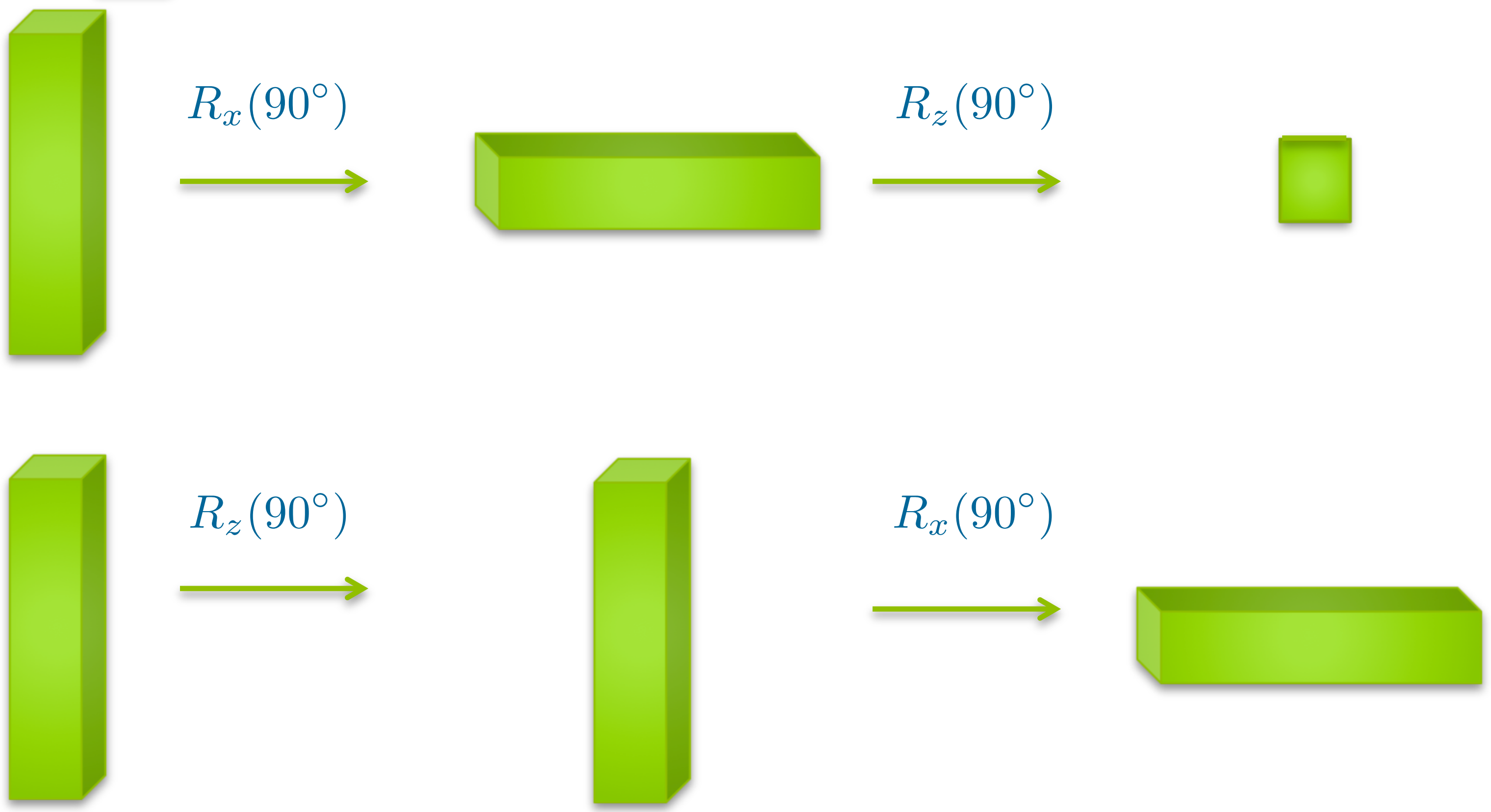
Comece observando que rotações sobre o mesmo eixo comutam, sobre eixos diferentes, nem sempre:



Momento Angular



rotações sobre eixos diferentes, nem sempre comutam



Momento Angular

Vamos mostrar isso quantitativamente. Comecemos representando rotações por matrizes 3×3, reais e ortogonais:

Considere um vetor $\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$. Quando rodamos o sistema (para nós, eixos não rodam) as componentes mudam para: $\mathbf{V}' = \begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix}$. As componentes se relacionam da seguinte forma: $\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$

A norma $\begin{pmatrix} V_x & V_y & V_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = |\mathbf{V}|^2$ é conservada, se $R^T R = 1$, ou seja, se R é ortogonal, temos.

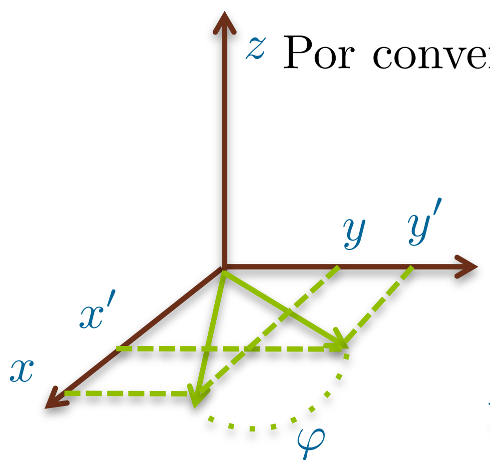
$$\begin{pmatrix} V_x' & V_y' & V_z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = |\mathbf{V}'|^2 = \begin{pmatrix} V_x & V_y & V_z \end{pmatrix} R^T R \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = |\mathbf{V}|^2.$$

Momento Angular

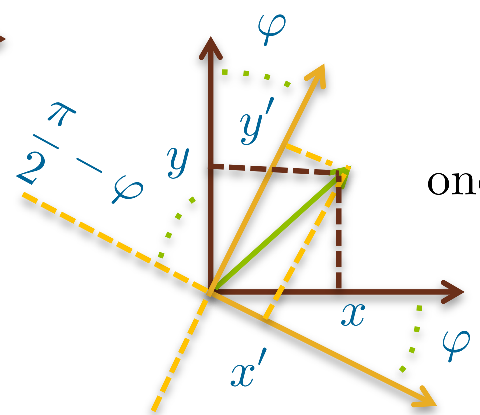
Comecemos com uma rotação de φ ao redor do eixo z. A matriz que representa esta operação é dada por:

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ o que implica em: } \begin{cases} x' = x\cos\varphi - y\sin\varphi \\ y' = x\sin\varphi + y\cos\varphi \\ z' = z \end{cases}$$

Observe que, por convenção, estamos rodando o vetor (sistema) e não os eixos, mas as convenções estão relacionadas: rodar o sistema mantendo os eixos fixos é equivalente a manter o sistema fixo e rodar os eixos ao contrário.



Por convenção $\varphi > 0$ no sentido anti=horário. Fica mais fácil ver a matriz acima, se mantivermos o vetor fixo e rodarmos os eixos ao contrário.



onde: $\begin{cases} x' = x\cos\varphi - y\cos\left(\frac{\pi}{2} - \varphi\right) \\ y' = x\sin\varphi + y\cos\varphi \\ z' = z \end{cases}$

Momento Angular

Olhando para $R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ podemos obter a matriz que gera rotações infinitesimais ao redor de z. Basta tomar $\varphi = \epsilon$ pequeno. Isto é:

$R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. Para obter as matrizes que rodam ϵ sobre os outros eixos, rode ciclicamente em $x(x'), y(y')$ e $z(z')$ a expressão

$\begin{cases} x' = x(1-\frac{\epsilon^2}{2}) - y\epsilon \\ y' = x\epsilon + y(1-\frac{\epsilon^2}{2}) \\ z' = z \end{cases}$ por exemplo $\begin{cases} y' = y(1-\frac{\epsilon^2}{2}) - z\epsilon \\ z' = y\epsilon + z(1-\frac{\epsilon^2}{2}) \\ x' = x \end{cases}$ fornece

$R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1-\frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}$ com $\begin{cases} x \to y;\ y \to z;\ z \to x \\ x' \to y';\ y' \to z';\ z' \to x' \\ R_z(\epsilon) \to R_x(\epsilon) \end{cases}$

De forma similar, obtenha $R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}$

Algumas observações

Note agora que $R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1-\epsilon^2 \end{pmatrix}$ e que é diferente de

$$R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\epsilon^2}{2} & \epsilon^2 & \epsilon \\ 0 & 1-\frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1-\epsilon^2 \end{pmatrix}$$ e que a diferença

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\epsilon^2) - 1 = R_z(\epsilon^2) - R_\forall(0)$$

onde todos os termos de ordem superior à ϵ^2 foram desprezados. Esta relação será útil para deduzirmos relações de comutação de momento angular em mecânica quântica.

Operador que roda kets

Como caracterizar rotações na Mecânica Quântica? Dado R, matriz 3×3, associamos à ela $D(R)$, um operador, tal que:

$$|\alpha\rangle_R = D(R)|\alpha\rangle$$

A representação matricial de $D(R)$ depende da dimensão do espaço que representa $|\alpha\rangle$.

Por exemplo $\begin{cases} N = 2 \to \text{ spin } \frac{1}{2}, \; D(R) \to \text{ matriz } 2 \times 2 \\ N = 3 \to \text{ spin } 1, \; D(R) \to \text{ matriz } 3 \times 3, \text{ etc.} \end{cases}$

Veremos que rotação infinitesimal é uma forma de definir $D(R)$.

Chute $D = U_\epsilon = 1 - iG\epsilon$ com G sendo um operador Hermiteano.

Inspirado em $\begin{cases} G = \frac{p_x}{\hbar} \text{ p/ translação, onde } \epsilon = dx' \\ G = \frac{H}{\hbar} \text{ p/ evolução temporal, onde } \epsilon = dt, \end{cases}$

o que esperar? $G = \dfrac{J_k}{\hbar}$ p/ rotação ao redor do eixo k, onde $\epsilon = d\varphi$.

Adotaremos a notação mais geral: $D(\hat{n}, d\varphi) = 1 - i\dfrac{\mathbf{J}.\mathbf{n}}{\hbar}d\varphi$, onde D é um operador que, com auxílio de $\mathbf{J}$, roda kets quando o sistema é rodado de $d\varphi$ ao redor de $\mathbf{n}$. Não definimos $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$, pois queremos algo mais geral para tratar spin também.

Rotações finitas e algumas propriedades

Rotação finita

$$D_z(\varphi) = \lim_{N\to\infty} \Big[1 - i\frac{J_z}{\hbar}\Big(\frac{\varphi}{N}\Big)\Big]^N = \exp\Big(-i\frac{J_z\varphi}{\hbar}\Big) = 1 - i\frac{J_z\varphi}{\hbar} - \frac{J_z^2\varphi^2}{2\hbar^2} + \ldots$$

Postulado: *$D(R)$ tem o mesmo grupo de propriedades que R.*

Ou seja,
$$\begin{cases} 1)\ \text{Identidade: } R.1 = R \to D(R).1 = D(R) \\ 2)\ \text{Fechamento: } R_1R_2 = R_3 \to D(R_1)D(R_2) = D(R_3) \\ 3)\ \text{Inversa: } RR^{-1} = R^{-1}R = 1 \to D^{-1}(R)D(R) = D(R)D^{-1}(R) = 1 \\ 4)\ \text{Associativa: } R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3 = R_1R_2R_3 \to \\ D(R_1)(D(R_2)D(R_3)) = (D(R_1)D(R_2))D(R_3) = D(R_1)D(R_2)D(R_3) \end{cases}$$

Como ficaria a propriedade 5) $R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = R_z(\epsilon^2) - 1$?

$$\Big(1 - i\frac{J_x}{\hbar}\epsilon - \frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\Big)\Big(1 - i\frac{J_y}{\hbar}\epsilon - \frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\Big) - \Big(1 - i\frac{J_y}{\hbar}\epsilon - \frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\Big)\Big(1 - i\frac{J_x}{\hbar}\epsilon - \frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2}\Big) =$$
$$= 1 - i\frac{J_z}{\hbar}\epsilon^2 - 1$$

termos em ordem
$$\begin{cases} \epsilon^0 \to 1 - 1 = 1 - 1 \to 0 = 0 \\ \epsilon^1 \to -i\frac{J_y}{\hbar}\epsilon - i\frac{J_x}{\hbar}\epsilon + i\frac{J_x}{\hbar}\epsilon + i\frac{J_y}{\hbar}\epsilon = 0 \to 0 = 0 \\ \epsilon^2 \to -\frac{J_xJ_y\epsilon^2}{\hbar^2} - \frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2} - \frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2} + \frac{J_yJ_x\epsilon^2}{\hbar^2} + \frac{J_y^2\epsilon^2}{2\hbar^2} + \frac{J_x^2\epsilon^2}{2\hbar^2} = -i\frac{J_z\epsilon^2}{\hbar} \\ \text{ou seja: } J_xJ_y - J_yJ_x = i\hbar J_z \to [J_x, J_y] = i\hbar J_z \end{cases}$$

Generalizável: $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$