

3. Teoria do Momento Angular

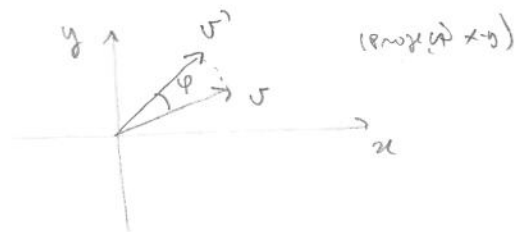
3.1 Rotações e Relações de Comutação para o Momento Angular

É bem sabido que rotações NÃO comutam. Nesse curso rotações serão sempre aplicadas em vetores ou kets, NÃO no sistema de eixos, que ficará sempre imóvel. Em \mathbb{R}^3 rotações são definidas por matrizes 3×3 ortogonais, tal que

$$\begin{pmatrix} v_x' \\ v_y' \\ v_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} ; \quad R R^T = R^T R = 1 ; \quad \|v'\| = \|v\|$$

Em particular, uma rotação em torno do z por um ângulo φ é

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Rotações nas outras direções podem ser obtidas por permutações cíclicas de (x, y, z) . A rotação em $R_z(\varphi)$ é

$$\begin{aligned} x' &= x \cos\varphi - y \sin\varphi \\ y' &= x \sin\varphi + y \cos\varphi \\ z' &= z \end{aligned}$$

Uma rotação de φ em torno de R_x é obtida fazendo $(x, y, z) \rightarrow (y, z, x)$

$$\begin{aligned} y' &= y \cos\varphi - z \sin\varphi \\ z' &= y \sin\varphi + z \cos\varphi \\ x' &= x \end{aligned} \quad \rightarrow \quad R_x(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

e Analogamente, fazendo $(x, y, z) \rightarrow (z, x, y)$

$$\begin{aligned} z' &= z \cos\varphi - x \sin\varphi \\ x' &= z \sin\varphi + x \cos\varphi \\ y' &= y \end{aligned}$$

$$R_y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & \sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

Seja

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

então,

$$R_x(\epsilon) R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix}; R_y(\epsilon) R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & \epsilon^2 & \epsilon \\ 0 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix}$$

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

Exercício. Mostre que $R_x(\epsilon) R_y(\delta) - R_y(\delta) R_x(\epsilon) = R_z(\epsilon\delta) - 1$

ROTAÇÕES INFINITESIMAIS EM MECÂNICA QUÂNTICA

Para cada R em $\mathbb{R}^3 \rightarrow D(R)$ no espaço dos kets. Análogamente as translações espaciais e temporais $D(t)$ deve ser unitário, reduzindo-se a identidade para rotações nulas, etc. Escrevemos, para uma rotação ϵ na direção k

$$D_\epsilon^k = 1 - i G_k \epsilon; G_k^\dagger = G_k$$

e definimos o operador momento angular J_k como sendo o gerador de rotações, escolhendo $G_k = J_k / \hbar$. Veja que na mecânica clássica a

rotação $R_z(\epsilon)$ produz

$$\begin{aligned} x' &\approx x - \epsilon y && \equiv \partial F / \partial p_x \\ y' &\approx y + \epsilon x && \equiv \partial F / \partial p_y \\ z' &= z && \equiv \partial F / \partial p_z \end{aligned} \Rightarrow F = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}' + \epsilon (x p'_y - y p'_x) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} + \epsilon L_z$$

Assim,

$$D(\hat{m}, d\varphi) = 1 - i \frac{\mathbf{J} \cdot \hat{m}}{\hbar} d\varphi$$

Vamos ver que essa definição concorda com nossas expectativas clássicas.

9.

Rotações finitas ficam $D(\hat{n}, \varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{n} \varphi}$

Para conectar o operador $D(R)$ com as rotações usuais, e assim de fato definir os operadores J_k , vamos impor que $D(R)$ tem as mesmas propriedades do grupo que R :

<u>IDENTIDADE</u>	$R \cdot I = R \rightarrow D(R)I = D(R); D(\hat{n}, 0) = 1$
<u>Fechto</u>	$R_1 \cdot R_2 = R_3 \rightarrow D(R_1)D(R_2) = D(R_3)$
<u>INVERSA</u>	$R R^{-1} = I \rightarrow D(R)D^{-1}(R) = 1; D^{-1}(\hat{n}, \varphi) = D(\hat{n}, -\varphi)$
<u>Associatividade</u>	$R_1 (R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 \rightarrow D(R_1) (D(R_2)D(R_3)) = (D(R_1)D(R_2))D(R_3)$
<u>comutação</u>	$D(\hat{n}, \varepsilon)D(\hat{m}, \varepsilon) = D(\hat{m}, \varepsilon)D(\hat{n}, \varepsilon) = D(\hat{e}, \varepsilon^2) = 1$

$$\left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) - \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) =$$

$$\left(-\frac{J_x J_y \varepsilon^2}{\hbar^2} + \frac{J_y J_x \varepsilon^2}{\hbar^2}\right) \equiv 1 - \frac{iJ_z \varepsilon^2}{\hbar} - 1$$

$$J_x J_y - J_y J_x = i\hbar J_z \rightarrow \boxed{[J_x, J_y] = i\hbar J_z}$$

ou, genericamente $[J_i, J_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar J_k$

3.2 Sistemas com spin 1/2

O operador $S_z = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|] \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ Na

base $|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_+$

$|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_-$

, junto com $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$

nos permitem determinar S_x e S_y :

Escolvendo

$$S_x \equiv \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad S_y \equiv \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

92

$$[S_3, S_x] = i\hbar S_y \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2b \\ -2c & 0 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = \delta = 0$$

$$[S_y, S_3] = i\hbar S_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -2\beta \\ 2\gamma & 0 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow b = i\beta$$

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_3 \rightarrow \begin{pmatrix} 2ibc & 0 \\ 0 & -2ibc \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\hbar^2/2 & 0 \\ 0 & -i\hbar^2/2 \end{pmatrix} \Rightarrow c = -i\beta$$

escolhendo

$$a = d = 0$$

$$bc = \hbar^2/4$$

$$b = c = \hbar/2$$

$$\beta = -i\hbar/2$$

$$\gamma = i\hbar/2$$

e

$$S_x \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} [|1-\rangle\langle+| + |+\rangle\langle-|]$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{i\hbar}{2} [|1-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|]$$

Seja então $D_z(\varphi) = e^{-iS_z\varphi/\hbar}$. Vamos calcular $\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle$ e comparar com $\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_n$ onde $|\alpha\rangle_n \equiv D_z(\varphi)|\alpha\rangle$. Temos que calcular

$$D_z^\dagger(\varphi) S_x D_z(\varphi) = e^{\frac{iS_z\varphi}{\hbar}} S_x e^{-iS_z\varphi/\hbar}$$

que pode ser calculado facilmente substituindo $S_x = \frac{\hbar}{2} (|1-\rangle\langle+| + |+\rangle\langle-|)$. Vamos fazer uma prova que só depende das relações de comutação e não p/ todo operador de momento angular:

$$e^{\frac{iS_z\varphi}{\hbar}} S_x e^{-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}} = S_x + \underbrace{\left(\frac{i\varphi}{\hbar}\right) [S_3, S_x]}_{i\hbar S_y} + \frac{1}{2!} \underbrace{\left(\frac{i\varphi}{\hbar}\right)^2 [S_3, [S_3, S_x]]}_{i\hbar^2 S_x} + \frac{1}{3!} \underbrace{\left(\frac{i\varphi}{\hbar}\right)^3 [S_3, [S_3, [S_3, S_x]]]}_{i\hbar^3 S_x} + \dots$$

$$= S_x \left[1 - \varphi^2/2! + \dots \right] - S_y \left[\varphi - \frac{\varphi^3}{3!} + \dots \right]$$

$$= S_x \cos\varphi - S_y \sin\varphi$$

Obs

$$e^A B e^{-A} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f_k$$

$$f_0 = B$$

$$f_{k+1} = [A, f_k]$$

$$\Rightarrow \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R \equiv \langle S_x \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \varphi - \langle S_y \rangle \sin \varphi$$

análoga- U

$$\langle S_y \rangle_R = \langle S_x \rangle \sin \varphi + \langle S_y \rangle \cos \varphi$$

$$\langle S_z \rangle_R = \langle S_z \rangle$$

U

$$\begin{pmatrix} \langle S_x \rangle_R \\ \langle S_y \rangle_R \\ \langle S_z \rangle_R \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{R_2(\varphi)} \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}$$

Essa relação vale para qualquer \vec{J} !

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \langle J_k \rangle_R = \sum_i R_{ki} \langle J_i \rangle$$

A suposta é a seguinte: considere a rotação em S_z :

$$e^{-iS_z\varphi/\hbar} |\alpha\rangle = e^{-iS_z\varphi/\hbar} [|+\rangle \langle +|\alpha\rangle + |-\rangle \langle -|\alpha\rangle] = e^{-i\varphi/2} |+\rangle \langle +|\alpha\rangle + e^{i\varphi/2} |-\rangle \langle -|\alpha\rangle$$

para $\varphi = 2\pi$

$$|\alpha\rangle \rightarrow -|\alpha\rangle$$

Veremos que esse sinal de menos pode ser detectado!

ou para $\varphi = 4\pi$

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$$

Para ver como detectamos esse fenômeno de rotação por 4π vamos lembrar da precessão de um spin no campo $\vec{B} = B\hat{z}$. Para um elétron

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad ; \quad \vec{\mu} = \frac{q_e e}{m_e c} \vec{S} \quad \begin{matrix} q_e = 1 \\ g_e = 2 \end{matrix}$$

$$= \omega S_z$$

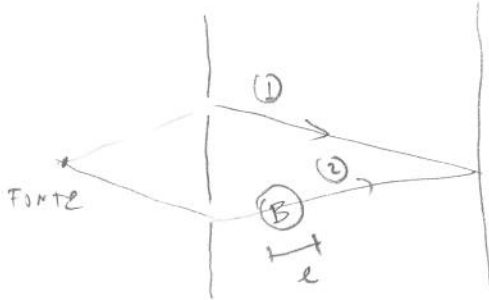
$$\omega = \frac{|e|B}{m_e c}$$

$$U(t, 0) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} = e^{\frac{-i\omega t S_z}{\hbar}} \equiv D(\hat{z}, \omega t)$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \langle S_x \rangle_t &= \langle S_x \rangle_0 \cos \omega t - \langle S_y \rangle_0 \sin \omega t \\ \langle S_y \rangle_t &= \langle S_x \rangle_0 \sin \omega t + \langle S_y \rangle_0 \cos \omega t \\ \langle S_z \rangle_t &= \langle S_z \rangle_0 \end{aligned}$$

MEDIDA DA FASE - I : INTERFEROMETRIA DE NEUTRONS

Considere a experiência onde neutrons tem dois caminhos possíveis para atingir um alvo e, ao longo de um deles, ele passa por uma região de comprimento l com campo $B\hat{z}$.



Suponha que os neutrons estejam com $|S_3 t\rangle$. Então, a fase adquirida no caminho 2 devido ao campo é

$$e^{-i\omega t/2} \quad \text{onde} \quad t = \frac{l}{v} = \frac{m_n l}{p_n} = \frac{m_n l \lambda}{h}$$

A função de onda no anteparo apresentará interferências devido às ações diferentes entre os caminhos (mesmo que $B=0$) e devido ao campo. Esta última é

$$\Delta\varphi = \frac{\omega t}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{g_n \mu_N B}{m_n c} \right) \frac{m_n l \lambda}{h} = \frac{g_n \mu_N l \lambda B}{2 h c} \quad (g_n \approx 2)$$

Variando o campo vemos a fase variar. Para uma variação de 2π precisamos de variar ωt de 4π , ou

$$\Delta B = \frac{4\pi h c}{e g_n \lambda l}$$

, o que é verificado experimentalmente.

MATRIZES DE PAULI e ESPINORES

Como o espaço dos kets de spin é 2-D podemos escrever tudo em notação de matrizes 2×2 e vetores linha (bras) ou colunas (kets) de dim = 2. (veja seções 1.3 na pg 10). Assim definiremos, na base $|+\rangle, |-\rangle$:

$$|+\rangle \doteq \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle \doteq \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

$$\langle \alpha| = (C_+^* \ C_-^*)$$

Definimos ainda as matrizes de Pauli σ_k por $S_k \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_k$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{veja pg. 97})$$

que possuem as seguintes propriedades:

- $\sigma_i^2 = 1$
- $\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}$
- $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$
- $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$
- $\det(\sigma_i) = -1$
- $\text{tr}(\sigma_i) = 0$

PARA um vetor 3-D $\vec{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}$ definimos

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{a} = a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_3 = \begin{pmatrix} a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & -a_z \end{pmatrix}$$

- $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$ (Prove! veja livro pg. 165)
- $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})^2 = |\vec{a}|^2 \quad \forall \vec{a} \text{ real.}$

O operador de rotações nesse espaço também pode ser representado facilmente por uma matriz 2x2. Veja que

$$D(\hat{n}, \varphi) = e^{\frac{-i\hat{n} \cdot \vec{\sigma}}{2} \varphi} \quad \text{e} \quad \text{que} \quad (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^k \begin{cases} = 1 & \text{se } k \text{ par} \\ = \vec{\sigma} \cdot \hat{n} & \text{se } k \text{ ímpar} \end{cases}$$

Expandindo a exponencial vemos que

$$D(\hat{n}, \varphi) = \mathbb{I} \cos \varphi/2 - i \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin \varphi/2$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \varphi/2 - i n_z \sin \varphi/2 & (-i n_x - n_y) \sin \varphi/2 \\ (-i n_x + n_y) \sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 + i n_z \sin \varphi/2 \end{pmatrix}$$

Dado um SPINOR $\chi = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$, sob a rotação ele é transformado em

$$\chi \rightarrow D(\hat{n}, \varphi) \chi = D_{ij} \chi_j$$

Veja que $\chi^\dagger \vec{\sigma} \chi = \begin{pmatrix} \chi^\dagger \sigma_x \chi \\ \chi^\dagger \sigma_y \chi \\ \chi^\dagger \sigma_z \chi \end{pmatrix} =$ vetor 3-D que se transforma (= valor esperado de $\vec{\sigma}$ no estado χ)

como $\chi^\dagger \vec{\sigma} \chi \rightarrow \chi^\dagger D^\dagger \vec{\sigma} D \chi$

Usando $D^\dagger \sigma_1 D = \sigma_1 \cos \varphi - \sigma_2 \sin \varphi$ (veja pg 97)

$$D^\dagger \sigma_2 D = \sigma_1 \sin \varphi + \sigma_2 \cos \varphi$$

$$D^\dagger \sigma_3 D = \sigma_3$$

vemos que $\chi^\dagger \sigma_k \chi \rightarrow \sum_e R_{ke} \chi^\dagger \sigma_e \chi$

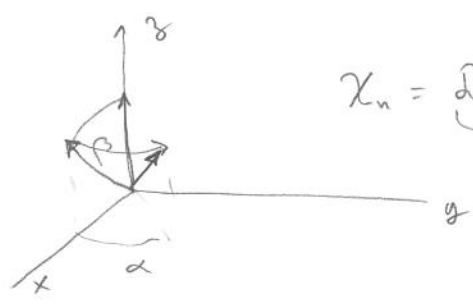
↳ matriz de rotação 3D (pg 94).

Essa análise é análoga ao que fizemos nas páginas 97 e 98.

Exercício Dado $\hat{n} = (\sin\beta \cos\alpha, \sin\beta \sin\alpha, \cos\beta)$, encontra

o autovalor de $\vec{\sigma} \cdot \hat{n}$, tal que $\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \chi_n = \chi_n$. O spinor χ_n pode ser construído rotando $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ de β em relação a \hat{y} e depois de α em relação a \hat{z}

$\sigma_3 |x_+\rangle = |x_+\rangle$
 $D(\sigma_3)^\dagger D |x_+\rangle = D |x_+\rangle$
 $\sigma_n |x_n\rangle = |x_n\rangle$



$\chi_n = D(\alpha, \hat{z}) D(\beta, \hat{y}) \chi_+$
 $\equiv D_{\alpha\beta}$

$$\chi_n = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta/2 & -\sin\beta/2 \\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta/2 e^{-i\alpha/2} \\ \sin\beta/2 e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}$$

$D_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos\beta/2 & -e^{-i\alpha/2} \sin\beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \sin\beta/2 & e^{i\alpha/2} \cos\beta/2 \end{pmatrix} \rightarrow \text{mostre que } D \sigma_3 D^\dagger = \sigma_n$

3.3 SO(3), SU(2) e rotações de Euler

Vamos agora sistematizar as propriedades do grupo das rotações. O número de parâmetros de uma rotação é 3: dois para especificar o eixo \hat{n} e um para o ângulo φ ; ou projeções cartesianas do vetor \hat{n} , etc. A melhor representação é por matrizes, que podem ser multiplicadas.

No caso de R ortogonal temos (9 entradas) - (6 condições $R R^T = R^T R = \mathbb{1}$)

O conjunto das R ortogonais forma um grupo:

- (a) Se $R_1, R_2 \in \text{grupo}$; $R_1 R_2 \in \text{grupo}$
 $(R_1 R_2) (R_1 R_2)^T = R_1 R_2 R_2^T R_1^T = R_1 R_1^T = \mathbb{1}$
- (b) Associativa $R_1 (R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3$; vale a mesma coisa para as matrizes em geral
- (c) Identidade \in grupo: $\mathbb{1}$ é ortogonal
- (d) $R^{-1} \in$ grupo: como $R R^T = \mathbb{1}$ $R^{-1} = R^T \Rightarrow (R^{-1}) (R^{-1})^T = R^T (R^T)^T = R^T R = \mathbb{1}$

GRUPO = SO(3) S = special (sem inversão).

Quando estudamos SEM as rotações ficam caracterizadas por matrizes unitárias 2×2 . Essas matrizes podem ser escritas na

forma
$$U(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^\dagger & a^\dagger \end{pmatrix} \text{ com } |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (\det U = 1)$$

$$U(a, b) U^\dagger(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^\dagger & a^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger & -b \\ b^\dagger & a \end{pmatrix} = \mathbb{I}$$

Comparando com $\mathcal{D}(\hat{n}, \varphi)$ na pg 101 temos

$$\operatorname{Re}(a) = \cos \varphi / 2 \quad \operatorname{Im}(a) = -n_3 \sin \varphi / 2$$

$$\operatorname{Re}(b) = -n_y \sin \varphi / 2 \quad \operatorname{Im}(b) = -n_x \sin \varphi / 2$$

O conjunto das matrizes U formam o grupo $SU(2)$. Em particular vale que

$$\begin{aligned} U(a_1, b_1) U(a_2, b_2) &= \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ -b_1^\dagger & a_1^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ -b_2^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_2 - b_1 b_2^\dagger & a_1 b_2 + b_1 a_2^\dagger \\ -a_1^\dagger b_2^\dagger - a_2^\dagger b_1^\dagger & a_1^\dagger a_2^\dagger - b_1^\dagger b_2 \end{pmatrix} \\ &= U(a_1 a_2 - b_1 b_2^\dagger, a_1 b_2 + b_1 a_2^\dagger) \end{aligned}$$

e que $|a_1 a_2 - b_1 b_2^\dagger| + |a_1 b_2 + b_1 a_2^\dagger| = 1 \Rightarrow$ o produto $\in SU(2)$

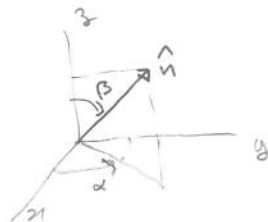
Relação entre $SO(3)$ e $SU(2)$

- Dado um ângulo φ podemos

representar uma rotação em torno de \hat{n} por uma matriz R da forma

$$R_{\hat{n}}(\varphi)$$

(veja o apêndice para ver a matriz explícita)



No entanto a relação entre matrizes de $SU(2)$ e de $SO(3)$ não

é $1:1$. Por exemplo $R_{\hat{n}}(2\pi) = R_{\hat{n}}(4\pi)$ MAS

$$U(\hat{n}, 2\pi) = -\mathbb{I} ; \quad U(\hat{n}, 4\pi) = +\mathbb{I}$$

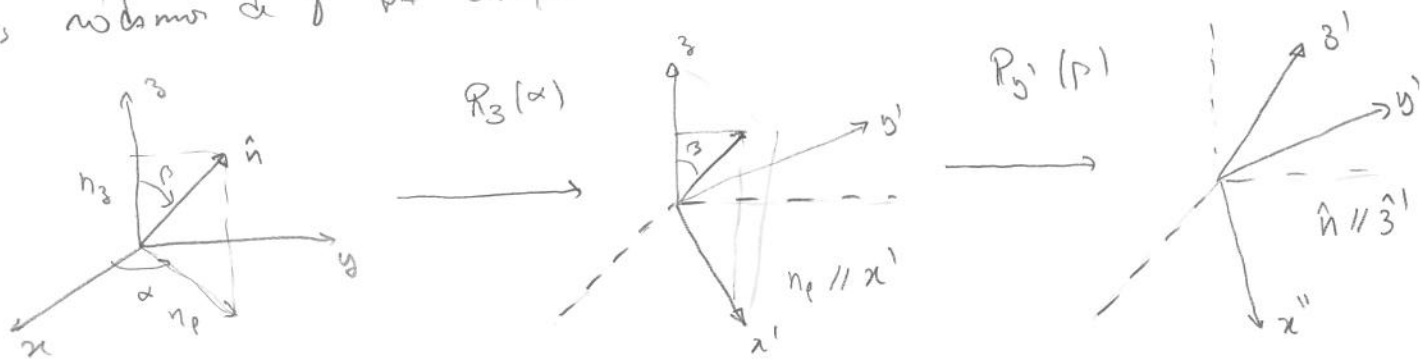
Mais genericamente,

$$U(\hat{n}, \psi) \text{ e } U(\hat{n}, \psi + 2\pi) \longrightarrow R_{\hat{n}}(\psi)$$

e a relação é 2 para 1. Veja que essa relação pode ser escrita como $U(a, b) \text{ e } U(-a, -b) \longrightarrow R$. Os grupos são APENAS localmente isomorfos.

rotações de Euler

Podemos especificar uma rotação genérica com o procedimento de Euler: usamos 2 rotações para posicionar \hat{z} sobre a direção localidade \hat{n} e depois rotacionamos de γ na direção \hat{n} :



O versor \hat{n} é $\hat{n} = (\sin\beta \cos\alpha, \sin\beta \sin\alpha, \cos\beta)$. Fazta rotar de γ (ou de ψ) em torno de \hat{n} . O processo completo é

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_2'(\gamma) R_{y'}(\beta) R_3(\alpha)$$

No entanto é fácil ver (faça com um livro) que

$$R_{y'}(\beta) = R_3(\alpha) R_y(\beta) R_3^{-1}(\alpha) \quad \text{e}$$

$$R_2'(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_3(\alpha) R_{y'}^{-1}(\beta)$$

Assim:

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_{y'}(\beta) R_3(\alpha) \underbrace{R_{y'}^{-1}(\beta) R_{y'}(\beta)}_I R_3(\alpha) \\ &= R_3(\alpha) R_y(\beta) \underbrace{R_3^{-1}(\alpha) R_3(\alpha)}_{R_3(\alpha) \text{ (comutam)}} R_3(\alpha) \end{aligned}$$

e

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_3(\alpha) R_2(\beta) R_3(\gamma)$$

No espaço do spin $1/2$ temos

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i\sigma_3 \alpha}{2}} e^{-\frac{i\sigma_2 \beta}{2}} e^{-\frac{i\sigma_3 \gamma}{2}} = \quad (\text{veja pg 101})$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta/2 & -\sin\beta/2 \\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos\beta/2 & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin\beta/2 \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin\beta/2 & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos\beta/2 \end{pmatrix} \in SU(2)$$

Exercício

Escreva ψ , n_x , n_y e n_z em termos de α , β e γ .

Resposta:

Escrevendo $n_x = \sin\beta \cos\alpha$; $n_y = \sin\beta \sin\alpha$; $n_z = \cos\beta$ $\Rightarrow \begin{cases} \alpha = \frac{\alpha - \beta - \pi}{2} \\ \cos\beta/2 = \cos(\frac{\alpha + \pi}{2}) \cos\beta/2 \\ \sin\beta = \sin\beta/2 / \sin\beta/2 \end{cases}$

Escreveremos ainda esse resultado como

$$D_{m'm}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle s=1/2, m' | e^{-iJ_3 \alpha / \hbar} e^{-iJ_2 \beta / \hbar} e^{-iJ_3 \gamma / \hbar} | s=1/2, m \rangle$$

que será estendido para $j \neq 1/2$.

3.4 OPERADOR DENSIDADE e ENSEMBLES Puros e MISTOS

Se quisermos medir o valor médio de A no estado $|\psi\rangle$ temos que produzir várias cópias do estado $|\psi\rangle$, um ensemble de estados, e medir A em cada elemento do ensemble. Fazemos então a média dos resultados obtidos:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \frac{1}{N} \sum (\text{medidas}) = \sum_m \left(\frac{N_m}{N} \right) a_m = \sum P(m) a_m$$

onde N_m = número de vezes que a_m foi obtido. Esse ensemble é dito puro, pois todos os seus elementos são idênticos.

$$\operatorname{Re}(a) = \omega \rho / 2 = \omega \left(\frac{\alpha + \pi}{2} \right) \omega \rho / 2 \quad (1)$$

$$\operatorname{Re}(b) = -\sin \bar{\rho} \sin \bar{\alpha} \sin \varphi / 2 = -\omega \left(\frac{\alpha - \pi}{2} \right) \sin \rho / 2 \quad (2)$$

$$\operatorname{Im}(a) = -\omega \bar{\rho} \sin \varphi / 2 = -\sin \left(\frac{\alpha + \pi}{2} \right) \omega \rho / 2 \quad (3)$$

$$\operatorname{Im}(b) = -\sin \bar{\rho} \omega \bar{\alpha} \sin \varphi / 2 = \sin \left(\frac{\alpha - \pi}{2} \right) \sin \rho / 2 \quad (4)$$

$$\frac{(4)}{(2)} = -\operatorname{tg} \left(\frac{\alpha - \pi}{2} \right) = \omega \operatorname{tg} \bar{\alpha} = -\operatorname{tg} (\bar{\alpha} + \pi / 2) \rightarrow$$

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha - \pi - \pi}{2}$$

$$(1) \rightarrow \omega \rho / 2 = \omega \left(\frac{\alpha + \pi}{2} \right) \omega \rho / 2$$

$$(2)^2 + (4)^2 \rightarrow \sin^2 \bar{\rho} \sin^2 \varphi / 2 = \sin^2 \rho / 2 \rightarrow$$

$$\sin \bar{\rho} = \frac{\sin \rho / 2}{\sin \varphi / 2}$$

Essas relações podem ser invertidas de modo que, dados $\bar{\alpha}$, $\bar{\rho}$ e φ podemos escrever a matriz de Euler:

$$(1)^2 + (3)^2 \rightarrow \omega \rho / 2 = \sqrt{\omega^2 \varphi / 2 + \sin^2 \frac{\varphi}{2} \omega^2 \bar{\rho}}$$

$$\frac{(1)}{(3)} \rightarrow \operatorname{tg} \left(\frac{\alpha + \pi}{2} \right) = \omega \bar{\rho} \operatorname{tg} \varphi / 2 \quad \text{usando } \frac{\varphi}{2} = -\bar{\alpha} + \frac{\alpha - \pi}{2}$$

$$= \operatorname{tg} (\alpha - \bar{\alpha} - \pi / 2) = -\omega \operatorname{tg} (\alpha - \bar{\alpha}) \Rightarrow$$

$$\alpha = \bar{\alpha} - \operatorname{Arccot} \operatorname{tg} [\omega \bar{\rho} \operatorname{tg} \varphi / 2]$$

$$\rho = \alpha - \pi - 2\bar{\alpha}$$

$$\bar{\rho} = \operatorname{Arccot} \operatorname{tg} [\omega \bar{\rho} \operatorname{tg} \varphi / 2] - \bar{\alpha} - \pi$$

Podemos, por exemplo, tomar os átomos que passam por um SG_z com spin up como o ensemble de estado $|+\rangle$.

E se quisermos descrever os átomos que saem da fenda, que não tem uma direção de spin fixa? Como descrever um ensemble misto?

Exemplo: considerar um ensemble com 50% de átomos $|+\rangle$ e 50% de átomos $|-\rangle$. Como descrevê-lo? Veja que

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle)$ NÃO descreve esse sistema

pois esse $|\psi\rangle$ é $|+\rangle_{xz}$ e nenhum átomo do ensemble está em $|+\rangle$

Para descrever ensembles mistos dessa forma precisamos do conceito de matriz de densidade.

OPERADOR DENSIDADE - Considerar um ensemble misto onde w_1 por cento das partículas estão em $|\alpha^1\rangle$, w_2 em $|\alpha^2\rangle$ etc. Os estados $|\alpha^i\rangle$ não precisam ser ortogonais mas

$\sum_i w_i = 1$; $w_i = \text{número reais}$

As medições A , vamos medi-lo em $|\alpha^i\rangle$ com probabilidade w_i e obtemos, para a média de A

$[A] = \sum_i w_i \langle \alpha^i | A | \alpha^i \rangle$
 $= \sum_{i,n} w_i \langle \alpha^i | a_n \rangle \langle a_n | \alpha^i \rangle a_n$
 $= \sum_n \langle a_n | \left[\sum_i w_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i| \right] A | a_n \rangle$

Definimos então o operador densidade do ensemble

$$\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^i\rangle\langle\alpha^i| \quad e$$

$$[A] = \sum_n \langle a_n | \rho A | a_n \rangle = \text{tr}(\rho A)$$

Veja que

$$\begin{aligned}
 (1) \quad \text{tr}(\rho) &= \sum_{i,n} w_i \langle b_n | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | b_n \rangle \\
 &= \sum_i w_i \langle \alpha^i | \left(\sum_n |b_n\rangle\langle b_n| \right) | \alpha^i \rangle \\
 &= \sum_i w_i \langle \alpha^i | \alpha^i \rangle = \sum w_i = 1
 \end{aligned}$$

(2) ρ é hermitiano, pois os w_i são reais

(3) Para um ensemble puro $\rho = |\alpha\rangle\langle\alpha|$ e $\rho^2 = \rho$ (operador idempotente), ou $\rho(\rho-1) = 0$, e $\text{tr}\rho^2 = 1$

(4) Se $|p_n\rangle$ são auto-estados de ρ e ρ é puro, então $\rho^2 |p_n\rangle = \rho_n^2 |p_n\rangle = \rho |p_n\rangle = \rho_n |p_n\rangle$ e $\rho_n^2 = \rho_n$

\Rightarrow Autovalores são 0 ou 1 apenas

$$\Rightarrow \text{nessa base} \quad \rho \doteq \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \rho = |p_k\rangle\langle p_k|$$

(só um autovalor 1 porque $\text{tr}\rho = 1$).

Exemplos

(1) Ensemble puro (ou polarizado) em $|S_z+\rangle$:

$$\rho = |+\rangle\langle+| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(2) Ensemble puro em $|S_x\pm\rangle$

$$\rho = |S_x\pm\rangle\langle S_x\pm| = \frac{1}{2} (|+\rangle \pm |-\rangle) (\langle+| \pm \langle-|)$$

$$\doteq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix}$$

(3) Ensemble "não-polarizado" = mistura de 50% de $|+\rangle$ e 50% de $|-\rangle$

$$\rho = \frac{1}{2} |+\rangle\langle+| + \frac{1}{2} |-\rangle\langle-| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Um ensemble "não-polarizado" poderia ser descrito também como 50% de $|S_x+\rangle$ e 50% de $|S_x-\rangle$. De fato

$$\rho = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} |S_x+\rangle\langle S_x+| + \frac{1}{2} |S_x-\rangle\langle S_x-|$$

\Rightarrow um ensemble pode ser decomposto de várias formas.

(4) Mistura 0.75 de $|+\rangle$ e 0.25 de $|S_x+\rangle$

$$\rho = 0.75 |+\rangle\langle+| + 0.25 |S_x+\rangle\langle S_x+| = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix}$$

Mostra que

$$[S_x] = \hbar/8$$

$$[S_y] = 0$$

$$[S_z] = 3\hbar/8$$

Se não alterarmos o ensemble, ele evolui porque os estados $|\alpha_i\rangle$ evoluem. Assim

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= i\hbar \sum_i w_i \underbrace{\frac{\partial |\alpha_i\rangle}{\partial t} \langle \alpha_i|} + i\hbar \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \underbrace{\frac{\partial \langle \alpha_i|}{\partial t}} \\ &= \sum_i \underbrace{H|\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|}_{\frac{1}{i\hbar} H|\alpha_i\rangle} - |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \underbrace{H}_{\frac{1}{i\hbar} H} = -[\rho, H] \end{aligned}$$

Esse resultado deve ser comparado com a evolução de distribuições clássicas no espaço de fases, $\rho_c(q,p)$ onde

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} = -[\rho_c, H] \quad \text{parêntesis de Poisson}$$

veja Goldstein, cap. 9.8

BASES CONTÍNUAS - Como o traço é independente de base podemos usar bases contínuas, como $|x\rangle$:

$$[A] = \text{tr}(\rho A) = \int \langle x' | \rho | x'' \rangle \langle x'' | A | x' \rangle dx' dx''$$

$$\text{onde } \langle x' | \rho | x'' \rangle = \sum_i w_i \langle x' | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | x'' \rangle = \sum_i w_i \psi_i^*(x'') \psi_i(x')$$

Exemplo: $A = x$; $\langle x'' | A | x' \rangle = x' \delta(x'' - x')$

$$[x] = \int \sum_i w_i |\psi_i(x)|^2 x dx = \sum_i w_i \int x |\psi_i(x)|^2 dx$$

Vamos comparar uma matriz de densidade aleatória, onde todos estados entram com pesos iguais, com um estado puro:

$$\frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 0 & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

Aleatório puro

Para caracterizar ensemble quaisquer entre esses dois extremos definiremos

$$\sigma = -\text{tr}(p \ln p) = -\sum_{k=1}^N p_{kk} \ln p_{kk} \quad \text{na base que diagonaliza } p$$

Então temos

- caso aleatório $p_{kk} = \frac{1}{N} \rightarrow \sigma = \ln N$
- caso puro $p_{kk} = 0$ or $1 \rightarrow \sigma = 0$

$\Rightarrow \sigma$ caracteriza o "grau de desordem" do ensemble e definiremos

$$S = k\sigma = \text{entropia quântica.}$$

Como ilustração considere um sistema em "equilíbrio térmico", definido como o ensemble com máxima entropia de Helmholtz que

$$\text{tr}(p) = 1$$

$$\text{tr}(pH) = U = \text{energia interna fixa}$$

No equilíbrio $\frac{\partial P}{\partial t} = 0 \Rightarrow [P, H] = 0$ e a base de H 111

diagonaliza P . Assim os valores ficam

$$\sum p_{kk} = 1$$

$$\sum p_{kk} E_k = U$$

Como existem vínculos não podemos fazer $\delta \sigma = -\sum \delta p_{kk} \ln p_{kk} - \sum \delta p_{kk} = 0$ e gerar os coeficientes de δp_{kk} , pois eles não são independentes. Dos N δp_{kk} apenas $N-2$ são independentes, pois temos 2 vínculos. Usamos o método dos multiplicadores de Lagrange: definimos

$$F = \sigma - \beta (\sum p_{kk} E_k - U) - \gamma (\sum p_{kk} - 1)$$

= σ quando os vínculos são satisfeitos

$$\delta F = -\sum \delta (p_{kk} \ln p_{kk}) - \beta \sum \delta p_{kk} E_k - \gamma \sum \delta p_{kk}$$

$$= \delta p_{11} () + \delta p_{12} () \dots + \delta p_{N-1, N-1} () + \delta p_{NN} ()$$

Escolhemos: $\delta p_{11} \rightarrow \delta p_{N-2, N-2}$ como independentes

β e γ tal que os coef. de $\delta p_{N-1, N-1}$ e δp_{NN} se anulam

\Rightarrow os coeficientes de δp_{kk} ficam todos nulos no problema.
Temos então N equações + 2 equações de vínculo p/ $p_{11}, \dots, p_{N-1, N-1}, \beta$ e γ .

$$\delta F = \sum_k \delta p_{kk} \left[-\ln p_{kk} - 1 - \beta E_k - \gamma \right] = 0$$

$$p_{kk} = \text{const } e^{-\beta E_k} \rightarrow p_{kk} = \frac{e^{-\beta E_k}}{\sum_k e^{-\beta E_k}} = \frac{\text{ENSEMBLE}}{\text{ANSIMCO}}$$

(isso define o multiplicador β)

Definimos

$$Z = \sum_k e^{-\beta E_k} = \text{função de partição}$$

11'

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} = \text{operador densidade canônico}$$

O multiplicador β fica determinado implicitamente pelo valor fixo de U . No entanto, é mais conveniente deixar β livre e defini-lo como $1/KT$, $T \equiv$ temperatura de equilíbrio.

Exemplos

$$1) \quad U = \text{tr}(\rho H) = \frac{\sum_k E_k e^{-\beta E_k}}{\sum_k e^{-\beta E_k}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad ; \quad \beta = \frac{1}{KT}$$

2) Ensemble de spin $1/2$ com $H = \omega S_z$ (campo mag. $\vec{B} = B_0 \hat{z}$)

$$Z = e^{-\beta \hbar \omega / 2} + e^{+\beta \hbar \omega / 2} = 2 \cosh \beta \hbar \omega / 2$$

$$\rho = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta \hbar \omega / 2} & 0 \\ 0 & e^{+\beta \hbar \omega / 2} \end{pmatrix} \quad \text{na base } |+\rangle, |-\rangle.$$

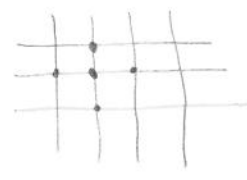
$$[S_z] = \text{tr}(\rho S_z) = \text{tr} \left[\begin{pmatrix} e^{-\beta \hbar \omega / 2} & 0 \\ 0 & e^{+\beta \hbar \omega / 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \right]$$

$$= \text{tr} \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2Z} e^{-\beta \hbar \omega / 2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2Z} e^{+\beta \hbar \omega / 2} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{Z} \sinh \frac{\beta \hbar \omega}{2}$$

$$= -\frac{\hbar}{2} \tanh \beta \hbar \omega / 2$$

$$[S_x] = [S_y] = 0$$

3) Modelo de Ising - Considere uma rede de spins, como em um metal, sujeita a um campo externo $B_0 \hat{z}$.



A Hamiltoniana é:

$$H = -b \sum_{i=1}^N \sigma_{iz} - \frac{2J}{h} \sum_{i,j \in V_i} \sigma_{iz} \sigma_{jz} \quad V_i = \text{vizinhos do sítio } i$$

↳ interação tende a alinhar os spins (ferromagnetismo)

Definimos a magnetização média por spin

$$m_i = \langle \sigma_{iz} \rangle$$

e fazemos a aproximação de campo médio: $m_i = m$ (igual para todos sítios) e

$$H = -b \sum_i \sigma_{iz} - \frac{2J}{h} \sum_i \sigma_{iz} \left(\frac{\sum_{j \in V_i} \sigma_{jz}}{z} \right) \quad z = \text{n}^\circ \text{ de vizinhos}$$

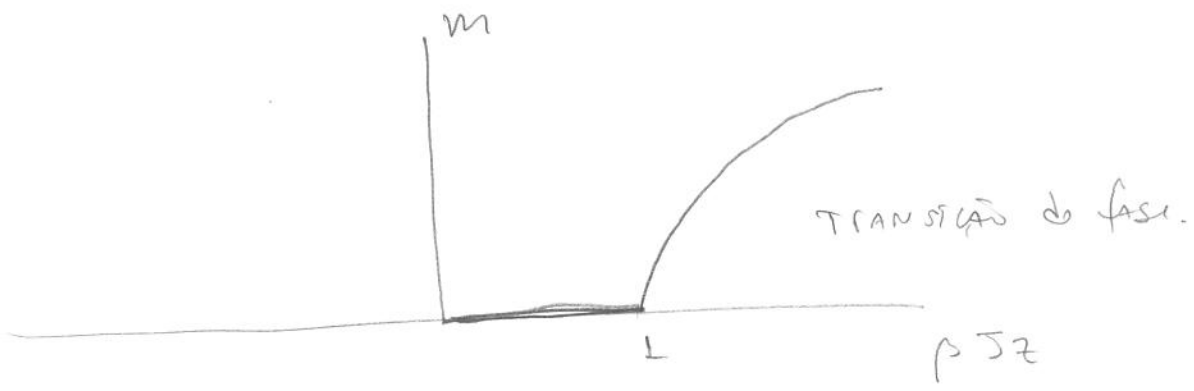
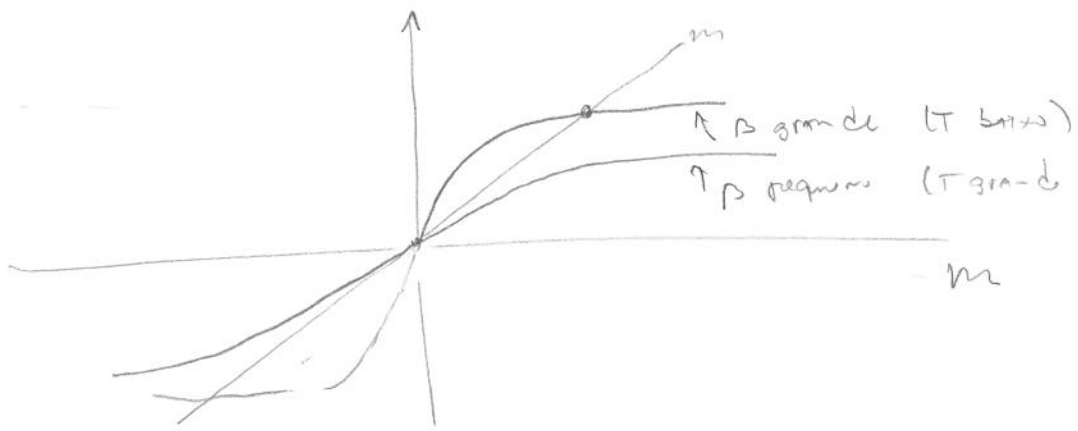
$$= -\left(b + \frac{2Jzm}{h}\right) \sum_i \sigma_{iz} \rightarrow \text{desacoplamos os spins.}$$

Para cada spin temos $H = -\Omega \sigma_z$ e

$$\langle \sigma_z \rangle = + \tanh\left(\frac{\beta h \Omega}{2}\right)$$

Se $b=0$ (sem campo externo) isso dá

$$m = \tanh(Jz\beta m)$$



A obtenção do espectro dos operadores de momento angular baseia-se em duas propriedades importantes:

(1) $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ comuta com J_i

(2) $J_{\pm} \equiv J_x \pm i J_y$ funcionam como "operadores escada"

Da propriedade (1), e do fato que $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$, J_z e J^2 comutam e possuem auto-estados em comum:

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

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

Prova de (1)

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

$$= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y = 0$$

$\underbrace{[J_x, J_z]}_{-i\hbar J_y}$ $\underbrace{[J_x, J_z]}_{-i\hbar J_y}$ $\underbrace{[J_y, J_z]}_{i\hbar J_x}$ $\underbrace{[J_y, J_z]}_{i\hbar J_x}$

idem $[J^2, J_y]$ e $[J^2, J_x]$

Para determinar a ação de J_{\pm} sobre $|a, b\rangle$ calculamos

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x] \pm i [J_z, J_y] = i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = \pm\hbar J_{\pm}$$

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

Então:

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

$$J^2 J_{\pm} |a, b\rangle = J_{\pm} J^2 |a, b\rangle = a J_{\pm} |a, b\rangle$$

$$\boxed{J_{\pm} |a, b\rangle = c^{\pm} |a, b \pm \hbar\rangle}$$

onde c^{\pm} é uma constante de normalização que determinaremos.

Vamos agora mostrar que b é limitado, i.e., que

$$b^2 \leq a.$$

Para isso calculamos

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

Então $\frac{1}{2} \langle a | J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+ | a \rangle \geq 0$ pois é a soma de duas normas

mas então $\langle a | J^2 - J_z^2 | a \rangle = a - b^2 \geq 0$ e $\boxed{b^2 \leq a}$

Portanto, para a fixo existe b_{\max} tal que $J_+ | a, b_{\max} \rangle = 0$ e $| a, b_{\max} \rangle \neq 0$

Multiplicando à esquerda por J_- e usando $J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$

vem que $a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max} = 0$ ou $\boxed{b_{\max}(b_{\max} + \hbar) = a}$

Da mesma forma existe b_{\min} t.q. $J_- | a, b_{\min} \rangle = 0$.

Multiplicando por J_+ e usando $J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ vem

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

Iguando as duas expressões obtemos $b_{\min} = -b_{\max}$

Finalmente existe n inteiros tal que

$$J_+^n |a_{\min}\rangle \sim |a_{\max}\rangle$$

ou seja

$$b_{\max} = b_{\min} + n\hbar = -b_{\max} + n\hbar \quad \text{e então}$$

$$b_{\max} = \frac{n\hbar}{2} = \text{semi-inteiro de } \hbar$$

Notação

$$\frac{b_{\max}}{\hbar} \equiv j \quad \rightarrow \quad a = \hbar j(\hbar j + \hbar) = \hbar^2 j(j+1)$$

$$b = m\hbar \quad \text{com } m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

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

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

$j = \text{semi-inteiro}$
 $2j+1$ valores de m

ELEMENTOS DE MATRIZ

temos que

$$\langle j' m' | J^2 | j m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$\langle j' m' | J_z | j m \rangle = \hbar m \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Para calcular as matrizes de J_x e J_y calculamos primeiro as matrizes de J_+ e J_- :

$$J_+ |j m\rangle = C_+ |j, m+1\rangle$$

Tomando a norma:

$$\langle j m | J_- J_+ | j m \rangle = |C_+|^2$$

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

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

Analogamente calculamos C_- . O resultado é

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

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

e

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

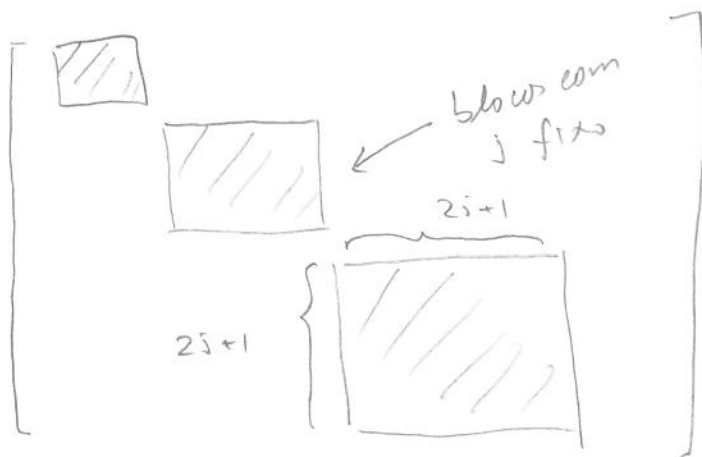
$$\langle j' m' | J_- | j m \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{j j'} \delta_{m', m-1}$$

REPRESENTAÇÕES DO OPERADOR DE ROTAÇÃO

$$D_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j' m' | e^{-i \mathbf{J} \cdot \hat{n} \varphi / \hbar} | j m \rangle \delta_{j' j}$$

(veja que $j' \rightarrow j$, pois o elemento seu nulo se $j' \neq j$, já que \mathbf{J} não altera o autovalor de J^2). Então $D_{m'm}^{(j)}$ tem a forma

↓ blocos:



Cada bloco, por sua vez, NÃO pode ser quebrado em sub-blocos diagonais. Os blocos $(2j+1) \times (2j+1)$ são chamados de representações irredutíveis de $\mathcal{D}(R)$.

As matrizes de rotação para um j fixo formam um grupo e seu significado pode ser visto rotando um estado $|j m\rangle$:

$$D(R) |j m\rangle = \sum_{j' m'} |j' m'\rangle \langle j' m' | D(R) |j m\rangle$$

$$= \sum_{m'} |j m'\rangle \underbrace{\langle j m' | D(R) |j m\rangle}_{\text{Amplitude de probabilidade do estado original } |j m\rangle \text{ ser medido em } |j m'\rangle}$$

Como ilustração vamos usar a representação de Euler (veja pg 105):

$$D_{m'm}^{(j)} = \langle j m' | e^{-iJ_z \alpha / \hbar} e^{-iJ_y \beta / \hbar} e^{-iJ_z \gamma / \hbar} |j m\rangle$$

$$= e^{-i(m'd + m\gamma)} \underbrace{\langle j m' | e^{-iJ_y \beta / \hbar} |j m\rangle}_{d_{m'm}^{(j)}(\beta)}$$

PARA $J=1/2$ (veja pg 105) obtemos

$$d^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta / 2 & -\sin \beta / 2 \\ \sin \beta / 2 & \cos \beta / 2 \end{pmatrix}$$

Para $J=1$ a matriz será 3×3 . Nesse caso J_y^2 NÃO é proporcional à identidade. O que é possível mostrar é que:

$$J_y^{(l=1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad e$$

$$\left(\frac{J_y^{(l=1)}}{\hbar} \right)^3 = \frac{J_y^{(l=1)}}{\hbar}$$

- Prove essa relação
- porque, isso NÃO invalida $J_0^2 = \mathbb{1} \hbar^2$? (dica: calcule $\det J_y$)

Então,

$$e^{-iJ_y \beta / \hbar} = 1 - i\beta \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) + \frac{(-i\beta)^2}{2!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 + \frac{(-i\beta)^3}{3!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) + \frac{(-i\beta)^4}{4!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 + \dots$$

$$= 1 - i \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) \left[\beta - \frac{\beta^3}{3!} + \dots \right] + \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 \left[1 - \frac{\beta^2}{2} + \frac{\beta^4}{4!} \dots \right]$$

ou

$$e^{-iJ_y \beta / \hbar} = 1 - \frac{i \sin \beta J_y}{\hbar} + \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (\cos \beta - 1)$$

Como

$$\left(J_y^{(l=1)}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$d_{m' m}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}$$

Veremos um método mais sistemático em 3.8

3.6 Momento Angular Orbital

- O momento angular de um

partícula sem spin pode ser definido como

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

ou, explicitamente

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y \\ L_y &= z p_x - x p_z \\ L_z &= x p_y - y p_x \end{aligned}$$

É fácil mostrar que $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ usando diretamente $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$. Vamos mostrar que \mathbf{L} ainda é o gerador de rotações, conforme definimos antes. Seja

$$1 - \frac{i}{\hbar} \delta \varphi L_z = 1 - \frac{i \delta \varphi}{\hbar} (x p_y - y p_x)$$

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{iS\varphi}{\hbar} (x'p_y - y'p_x) \right] |x'y'z'\rangle &= \left[1 - \frac{iS\varphi}{\hbar} (x'p_y - y'p_x) \right] |x'y'z'\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} S\mathbf{r}' \cdot \mathbf{P} \right] |x'y'z'\rangle \quad \text{com } S\mathbf{r}' = (-S\varphi y', S\varphi x', 0) \\ &= |x' - S\varphi y', y' + S\varphi x', z'\rangle \end{aligned}$$

que é exatamente uma rotação de $S\varphi$ em torno de z . Portanto, o fato de \mathbf{P} gerar translações implica que \mathbf{L} gera rotações. Em termos de coordenadas esféricas temos $|r, \theta, \varphi + S\varphi\rangle$.

Aplicando em um ket $|\alpha\rangle$ genérico vemos que

$$\begin{aligned} \langle x'y'z' | 1 - \frac{iS\varphi}{\hbar} L_z | \alpha \rangle &= \langle x' + S\varphi y', y' - S\varphi x', z' | \alpha \rangle \\ &\downarrow \\ \langle r, \theta, \varphi | 1 - \frac{iS\varphi}{\hbar} L_z | \alpha \rangle &= \langle r, \theta, \varphi - S\varphi | \alpha \rangle \\ &= \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle - \frac{\partial}{\partial \varphi} (\langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle) S\varphi \end{aligned}$$

o que leva a

$$\boxed{\langle r, \theta, \varphi | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle)}$$

Para as componentes x e y fazemos algo parecido:

$$\begin{aligned} \langle x'y'z' | 1 - \frac{iS\varphi}{\hbar} L_x | \alpha \rangle &= \langle x', y' + z'S\varphi, z' - y'S\varphi | \alpha \rangle \\ -i \frac{S\varphi}{\hbar} \langle x'y'z' | L_x | \alpha \rangle &= \frac{\partial}{\partial y'} (\langle x'y'z' | \alpha \rangle) z'S\varphi - \frac{\partial}{\partial z'} (\langle x'y'z' | \alpha \rangle) y'S\varphi \end{aligned}$$

Escrevendo

$$\begin{aligned} y' &= r \sin\theta \sin\varphi \\ z' &= r \cos\theta \\ \frac{\partial}{\partial y'} &= \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\omega\varphi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z'} &= \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

(veja NOTAS DE AULA "Operadores de momento Angular em coordenadas esféricas" na página do curso).

120

$$\begin{aligned} \langle r\theta\varphi | L_x | \alpha \rangle &= i\hbar \left[r\cos\theta \left(\cancel{\sin\theta \frac{\partial}{\partial r}} + \frac{\cos\theta \sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - r\sin\theta \left(\cancel{\cos\theta \frac{\partial}{\partial r}} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle r\theta\varphi | \alpha \rangle \\ &= -i\hbar \left[-\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \cos\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \langle r\theta\varphi | \alpha \rangle \end{aligned}$$

Similaneamente mostra-se que

$$\langle r\theta\varphi | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left[\cos\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \langle r\theta\varphi | \alpha \rangle$$

$$\langle r\theta\varphi | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r\theta\varphi | \alpha \rangle$$

$$\langle r\theta\varphi | L^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle r\theta\varphi | \alpha \rangle$$

que é a parte angular do \mathbb{D}^2 em coordenadas esféricas:

$$\frac{1}{2m} \langle x' | \mathbb{D}^2 | \alpha \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle x' | \alpha \rangle + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle x' | \alpha \rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \langle x' | L^2 | \alpha \rangle \right]$$

Em particular, para uma partícula em um potencial central $V(r)$

a equação de Schrödinger fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{m r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{L^2 \psi}{2m r^2} + V(r) \psi = E \psi$$

Como $[H, L^2] = [H, L_3] = 0$, pois H só depende de r e de L^2 e L^2 não depende de r , existem auto-estados

simultâneos de H , L^2 e L_3 na forma

12

$$\langle x' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

onde $L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$; $L_3 Y_{lm} = m \hbar Y_{lm}$. Veremos isso em mais detalhes a seguir . Por enquanto vamos chamar $|l, m\rangle$ os auto-estados de L^2 e L_3 e definir um arbóreo de direção

$$|l, m\rangle \text{ tal que } \langle \hat{n} | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

seja a amplitude do ket $|l, m\rangle$ sobre no direção θ, φ especificada por \hat{n} .

Vamos então determinar os Y_{lm} explicitamente

$$(1) L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$\langle \hat{n} | L_3 |l, m\rangle = \hbar m \langle \hat{n} | l, m \rangle \rightarrow -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} = m \hbar Y_{lm}$$

$$\text{e } Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{lm}(\theta) e^{im\varphi} ; m \text{ inteiro apenas}$$

$$(2) L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \rightarrow \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \right] Y_{lm} =$$

$$(3) \langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \rightarrow \int d\Omega \langle l', m' | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Como a equação (2) é difícil de resolver diretamente, vamos resolver $L_+ |l, l\rangle = 0$ para obter $Y_{ll}(\theta, \varphi)$

e aplicar L_- para gerar os outros estados .

$$\langle \hat{n} | L_+ | l, l \rangle = 0 \rightarrow \left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f_l(\theta) e^{i l \varphi} = 0 \quad 12'$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} - l \cot \theta f = 0 \Rightarrow f_l(\theta) = C e^{\int \cot \theta d\theta} = C e^{\ln \sin \theta}$$

com

$$2\pi |C e|^2 \int_0^\pi \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta = 1$$

$$2\pi |C e|^2 \int_{-1}^1 (1-u^2)^l du \Rightarrow C e = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}$$

onde as fases são escolhidas por conveniência (veja o livro do Cohen para o cálculo da integral). Aplicando L_- temos

$$\langle \hat{n} | l, m-1 \rangle = \frac{\langle \hat{n} | L_- | l, m \rangle}{\hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \quad \text{começando em } m=l$$

o resultado geral é

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{i m \varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad m \geq 0$$

$$e Y_{l, -m}(\theta, \varphi) = (-1)^l [Y_{lm}(\theta, \varphi)]^*$$

Note que, como queremos unicidade das funções $\langle \hat{n} | l, m \rangle$, o valor de m deve ser inteiro, para que

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \langle \theta, \varphi + 2\pi | l, m \rangle$$

Para terminar essa seqüência vamos a relação entre os harmônicos esféricos $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ e as matrizes de rotação. A ideia central é rodar o ket $|\hat{z}\rangle$ para construir o ket genérico $|\hat{n}\rangle$. Em termos das rotações de Euler isso corresponde a girar de $\rho = \theta$ em torno de y e depois de $\alpha = \varphi$ em torno de z : *

$$|\hat{n}\rangle = D(\alpha = \varphi, \rho = \theta, \gamma = 0) |\hat{z}\rangle \equiv D(R) |\hat{z}\rangle$$

$$= \sum_{\ell, m} D(\ell, m) |\ell m\rangle \langle \ell m | \hat{z}\rangle$$

$$\langle \ell m' | \hat{n}\rangle = \sum_m \underbrace{\langle \ell m' | D(\ell, m) | \ell m\rangle}_{D_{m'm}^{(\ell)}} \underbrace{\langle \ell m | \hat{z}\rangle}_{Y_{\ell m}(\theta=0, \varphi)}$$

$$= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m,0}$$

$$Y_{\ell m'}(\theta, \varphi) = D_{m'0}^{(\ell)} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \quad \text{ou}$$

$$D_{m'0}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m'}(\theta, \varphi) \Big|_{\substack{\theta = \beta \\ \varphi = \alpha}}$$

Para $m' = 0$

$$D_{00}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell 0} = P_{\ell}(\cos\beta) \Big|_{\alpha = \beta} = \text{independente de } \alpha$$

* OBS

A seqüência de rotações é $R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) = R_z(\gamma) R_y(\beta) R_z(\alpha)$
 $= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$

$$I_e = \int_{-1}^1 (1-u^2)^e du = \int_{-1}^1 (1-u^2)(1-u^2)^{e-1} du$$

$$= I_{e-1} - \int_{-1}^1 (1-u^2)^{e-1} u du$$

$$\begin{aligned} u' &= u & du' &= du \\ v' dv' &= u(1-u^2)^{e-1} & v' &= +\frac{1}{2l}(1-u^2)^e \end{aligned}$$

$$= I_{e-1} - \frac{1}{2l} (1-u^2)^e \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{1}{2l} (1-u^2)^e du$$

$$= I_{e-1} - \frac{1}{2l} I_e \quad \rightarrow \quad I_e \left(\frac{2l+1}{2l} \right) = I_{e-1}$$

$$I_e = \left(\frac{2l}{2l+1} \right) I_{e-1} \quad ; \quad I_0 = 2$$

$$I_e = \frac{(2l)(2l-1)(2l-2) \dots 2 \cdot 2}{(2l+1)(2l-1)(2l-3) \dots} = \frac{2 \cdot 2^l l! (2l)(2l-2) \dots}{(2l+1)(2l)(2l-1)(2l-2) \dots}$$

$$= \frac{2 \cdot 2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!}$$

$$|C_e|^2 = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{(2l+1)!}{2 \cdot 2^{2l} (l!)^2} e$$

$$C_e = \frac{(-1)^e}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

3.7 Adição de Momento Angular

A necessidade de somar momentos angulares aparece em várias situações. Quando consideramos uma partícula com spin temos que usar a base de kets

$$|x', \pm\rangle \equiv |x'\rangle \otimes |\pm\rangle$$

O momento angular agora é

$$J = L + S \equiv \underbrace{L \otimes \mathbb{1}}_{\text{só atua em } |x'\rangle} + \underbrace{\mathbb{1} \otimes S}_{\text{só atua em } |\pm\rangle}$$

e o operador de rotação fica

$$D(R) = e^{-iJ \cdot \hat{n} \phi / \hbar} = e^{-iL \cdot \hat{n} \phi / \hbar} e^{-iS \cdot \hat{n} \phi / \hbar} = D^{(orb)}(R) \otimes D^{(sp)}(R)$$

pois L e S comutam.

A função de onda correspondente ao estado $|\alpha\rangle$ tem agora duas componentes:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{\epsilon=\pm} \int d^3x' |x'\epsilon\rangle \langle x'\epsilon | \alpha \rangle \\ &= \int d^3x' \underbrace{\langle x' + | \alpha \rangle}_{\psi_+(x')} + \int d^3x' \underbrace{\langle x' - | \alpha \rangle}_{\psi_-(x')} \end{aligned}$$

que podemos arranger em um vetor

$$\begin{pmatrix} \psi_+(x') \\ \psi_-(x') \end{pmatrix} \equiv \text{spinor}$$

Veja que $|\psi_{\pm}(x')|^2 =$ densidade de probabilidade da partícula estar em x' com spin $+$ ou $-$.

Como L e S comutam, os kets espaciais podem ser tomados como auto-estados de L^2 e L_3 ($|n \ell m\rangle$) (Aqui n representa os autovalores de algum outro operador que comuta com L^2 e L_3). Os kets de spin são auto-estados de S^2 e S_3 com autovalores $3\hbar^2$ e $\pm \hbar/2$.

No entanto, existe uma outra base possível. Mostraremos que J^2 , J_3 , S^2 e L^2 também comutam entre si e podem ser usados no lugar de L_3 , S_3 , S^2 , L^2 .

Outro exemplo de soma de momentos angulares ocorre no caso de dois spins, S_1 e S_2 . Nesse caso

$$S = S_1 + S_2 = S_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_2$$

$$\text{com } [S_{1i}, S_{2j}] = 0$$

$$[S_{ki}, S_{kj}] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_{ke}$$

Vamos mostrar que $[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$, i.e., S é um operador de momento angular e portanto tem os seguintes autovalores:

$$\begin{aligned} S^2 &\rightarrow S(S+1)\hbar^2 \\ S_3 &\rightarrow m\hbar \\ S_{13} &\rightarrow m_1\hbar \\ S_{23} &\rightarrow m_2\hbar \end{aligned}$$

Na base comum \vec{n} $S_1^2 S_{13} S_2^2 S_{23}$ os estados são $|m_1 m_2\rangle$:

$|++\rangle$ $|+-\rangle$ $|-+\rangle$ $|--\rangle$

Na base de $S^2 S_3 S_1^2 S_2^2$ $|S m\rangle$:

$$\left. \begin{aligned} |11\rangle &= |++\rangle \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1-1\rangle &= |--\rangle \\ |00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{triplets} \\ \text{singlets} \end{array}$$

Dados dois operadores de momento angular J_1 e J_2 agindo em espaços distintos definimos

$$J = J_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes J_2 = J_1 + J_2$$

agindo no espaço produto. Em cada espaço original temos

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{1k} \quad (\text{idem p/2})$$

$$D_1(R) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_1 \cdot \hat{n} \phi} \quad (\text{ " })$$

No espaço produto temos:

$$D(R) = D_1(R) \otimes D_2(R) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_1 \cdot \hat{n} \phi} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_2 \cdot \hat{n} \phi} = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \hat{n} \phi}$$

$$\left. \begin{aligned} J_x &= J_{1x} + J_{2x} \\ J_y &= J_{1y} + J_{2y} \\ J_z &= J_{1z} + J_{2z} \end{aligned} \right\} \Rightarrow [J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

e portanto J também é um operador de momento angular.

ESCOLHAS PARA A BASE DE KETS NO ESPAÇO PRODUTO

(A) Auto-estados comuns de $J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}$: $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle$

$$J_1^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$J_2^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$J_{1z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar m_1 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$J_{2z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar m_2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

(B) Temos $[J^2, J_i^2] = 0$ pois $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$

e J_i^2 comuta com J_{ji} e com J_{zi} . Da mesma forma $[J_1^2, J_2^2] = 0$.
Temos ainda que $[J^2, J_3] = 0$ e também

$$[J_1^2, J_3] = [J_1^2, J_{13}] + [J_1^2, J_{23}] = 0$$

DA MESMA FORMA $[J_2^2, J_3] = 0$. Então os auto-estados comuns de J_1^2, J_2^2, J_3 formam uma base $|j_1, j_2; j, m\rangle \equiv |j, m\rangle$ com autovalores $\hbar^2 j_1(j_1+1)$; $\hbar^2 j_2(j_2+1)$; $\hbar^2 j(j+1)$; $\hbar m$.

RELAÇÃO ENTRE AS DUAS BASES - Escrevendo

$$|j, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, j_2, j, m\rangle}_{\text{Coeficientes de Clebsch-Gordan}}$$

que têm duas propriedades importantes:

(I) Os coeficientes são zero a menos que $m = m_1 + m_2$

PROVA: $(J_3 - J_{13} - J_{23}) |j, j_2; j, m\rangle = 0$

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | (J_3 - J_{13} - J_{23}) |j, j_2; j, m\rangle = 0 \quad \text{e}$$

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, j_2; j, m\rangle = 0$$

o que prova a propriedade.

(II) Os coeficientes são nulos a menos que $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$, o que é intuitivo pela adição clássica de dois vetores:

$$\vec{j}_2 \uparrow + \vec{j}_1 \uparrow = \vec{j}_1 + \vec{j}_2 \uparrow \quad ; \quad \vec{j}_1 \uparrow + \vec{j}_2 \downarrow = \vec{j}_1 - \vec{j}_2 \uparrow$$

O maior m possível é $j_1 + j_2$ quando somamos $|j_1, m_1 = j_1\rangle$ com $|j_2, m_2 = j_2\rangle$, e portanto $j = j_1 + j_2$ existe e o índice m varia de $-j \rightarrow +j$ para esse j , o que resulta em $2j+1 = 2(j_1 + j_2) + 1$ estados.

O próximo j é $j_1 + j_2 - 1$, que contribui $2(j_1 + j_2 - 1) + 1$ estados. Sabemos que o número total de estados da base tem que ser $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. De fato, para $j_1 > j_2$,

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = 2 * \frac{(2j_1)(2j_2+1)}{2} + [(j_1+j_2) - (j_1-j_2) + 1] \quad (*)$$

$$= 2j_1(2j_2+1) + (2j_2+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

O que mostra que j realmente varia em j_1, j_2 .

Por conveniência os coeficientes de Clebsch-Gordan são escolhidos como reais. Então a matriz de mudança de base é ortogonal: $OO^T = O^T O = I$, ou

$$\sum_{j,m} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, j_2, j, m \rangle \langle j, j_2; m, m' | j_1, j_2, j, m \rangle = \delta_{m, m'}$$

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2; j', m' | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle = \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}$$

Para $j' = j$ e $m' = m = m_1 + m_2$

$$\sum_{m_1, m_2} |\langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle|^2 = 1$$

$$* \sum_{j=a}^b 1 = (b-a+1)$$

$$\sum_{j=a}^b j = \frac{1}{2} (b+a)(b-a+1)$$

Podemos calcular sistematicamente todos os coeficientes de Clebsch-Gordan. Começamos com o estado com máximo j e máximo m . Como $m = m_1 + m_2$ esse estado é único, usaremos a notação abreviada $|j, m\rangle$ e $|m_1, m_2\rangle$:

$$\boxed{|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2\rangle}$$

Aplicando $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ e lembrando das relações NA PÁGINA 116 temos

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = J_{1-} |j_1, j_2\rangle + J_{2-} |j_1, j_2\rangle$$

$$\hbar \sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle =$$

$$\hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 1)} |j_1 - 1, j_2\rangle + \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - j_2(j_2 - 1)} |j_1, j_2 - 1\rangle$$

$$\sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{2j_1} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_2 - 1\rangle \quad e$$

$$\boxed{|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle}$$

Aplicando J_- novamente geramos o próximo estado com $j = j_1 + j_2$ e

$$m = j_1 + j_2 - 2 :$$

$$= \sqrt{2[2(j_1 + j_2) + 1]}$$

$$\hbar \sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2 - 2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle =$$

$$\hbar \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \left[\frac{\sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 2)}}{\sqrt{2(2j_1 + 1)}} |j_1 - 2, j_2\rangle + \frac{\sqrt{j_2(j_2 + 1) - j_2(j_2 - 1)}}{\sqrt{2j_2}} |j_1 - 1, j_2 - 1\rangle \right] +$$

$$\hbar \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \left[\frac{\sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 1)}}{\sqrt{2j_1}} |j_1 - 1, j_2 - 1\rangle + \frac{\sqrt{j_2(j_2 + 1) - (j_2 - 1)(j_2 - 2)}}{\sqrt{2(2j_2 + 1)}} |j_1, j_2 - 2\rangle \right]$$

$$|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle = \sqrt{\frac{j_1(2j_1-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}} |j_1-2, j_1\rangle +$$

$$2 \sqrt{\frac{j_1 j_2}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}} |j_1-1, j_2-1\rangle + \sqrt{\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}} |j_1, j_2-2\rangle$$

Continuando podemos gerar toda a família $|j_1+j_2, m\rangle$. Para gerar os estados da família $|j_1+j_2-1, m\rangle$ notamos que seu estado mais alto é

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle \Rightarrow m = j_1+j_2-1$$

Esse estado deve ser combinação linear de $|j_1, j_2-1\rangle$ e $|j_1-1, j_2\rangle$ e deve ser ortogonal ao estado $|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$. Então

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} |j_1-1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} |j_1, j_2-1\rangle$$

Aplicando $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ geramos sua família e assim sucessivamente.

Exemplo 1 $j_1 = j_2 = 1/2 \Rightarrow 0 \leq j \leq 1$

$$|11\rangle = |++\rangle$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$|1-1\rangle = |--\rangle$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Exemplo 2 $J_1 = l$; $J_2 = 1/2 \Rightarrow |l-1/2| \leq J \leq l+1/2$

Se $l \neq 0$ então são formadas duas famílias: $J = l+1/2$ e $J = l-1/2$. Para

A primeira família temos:

$$|l+1/2, l+1/2\rangle = |l, +\rangle$$

$$|l+1/2, l-1/2\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l-1, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, -\rangle$$

$$|l+1/2, l-3/2\rangle = \sqrt{\frac{2l-1}{2l+1}} |l-2, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{2l+1}} |l-1, -\rangle$$

$$\vdots$$

$$|l+1/2, l+1/2-k\rangle = \sqrt{\frac{2l+1-k}{2l+1}} |l-k, +\rangle + \sqrt{\frac{k}{2l+1}} |l-k+1, -\rangle$$

Chamando $l+1/2-k = m \rightarrow k = l+1/2-m$

$$|l+1/2, m\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} |m-1/2, +\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} |m+1/2, -\rangle$$

Os estados do tipo $|l-1/2, m\rangle$ devem ser ortogonais a estes. Portanto

$$|l-1/2, m\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} |m-1/2, +\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} |m+1/2, -\rangle$$

Como a parte orbital $|l, m\rangle$ tem uma representação em termos de harmônicos esféricos,

$$\langle \hat{n} | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

definimos as funções SPIN-ANGULARES como:

$$\begin{aligned}
 Y_{\ell}^{j=l\pm 1/2, m} &= \pm \sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} Y_{\ell}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \chi_{+} + \\
 &\quad \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} Y_{\ell}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \chi_{-} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l\pm m+\frac{1}{2}} Y_{\ell}^{m-1/2} \\ \sqrt{l\mp m+\frac{1}{2}} Y_{\ell}^{m+1/2} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

que são auto-funções simultâneas de J^2 , J_3 , L^2 e S^2 .

Além disso, como $\mathbb{L} \cdot \mathbb{S} = (J^2 - L^2 - S^2)/2$ os autovalores

de $\mathbb{L} \cdot \mathbb{S}$ são:

$$\frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}) = \begin{cases} \frac{\ell \hbar^2}{2} & \text{r/ } J = \ell + 1/2 \\ -\frac{(\ell+1)\hbar^2}{2} & \text{r/ } J = \ell - 1/2 \end{cases}$$

PARA terminar esta seção vamos deduzir uma relação de recorrência que pode t.b. ser usada para calcular os Clebsch-Gordan e que será usada na seção 3.10.

Comecemos com

$$J_{\pm} |j_1, j_2, j, m\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$$

$$\begin{aligned} \hbar \sqrt{(j_1 \mp m)(j_1 \pm m + 1)} |j_1, j_2, j, m \pm 1\rangle &= \sum_{m_1, m_2} \hbar \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1, j_2, m_1 \pm 1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle + \\ &\sum_{m_1, m_2} \hbar \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |j_1, j_2, m_1, m_2 \pm 1\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \end{aligned}$$

Note que $\sqrt{(j_1 \mp m)(j_1 \pm m + 1)} = \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m(m \pm 1)}$. Essa forma acima é a preferida do Sakurai e a segunda do Cohen. Multiplicando os dois membros por $\langle j_1, j_2, m_1, m_2 |$ temos:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j_1 \mp m)(j_1 \pm m + 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \pm 1\rangle &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j_1, j_2, j, m\rangle \end{aligned}$$

Onde usamos, por exemplo, no 1.º termo a relação

$$\begin{aligned} m_1 = m_1' \pm 1 \rightarrow m_1' = m_1 \mp 1; \quad (j_1 \mp m_1')(j_1 \pm m_1' + 1) &= (j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1) \\ m_2 = m_2' \end{aligned}$$