IV.5) Rotações, operadores tensoriais e o Teorema de Wigner-Eckart.

Como vimos nas seções anteriores a invariância por rotações é de importância fundamental na análise de um problema físico. Na realidade esta operação é simplesmente um exemplo de uma operação de simetria no sistema físico. Em geral o sistema pode ter mais simetrias, ou seja, ser invariante perante outras operações de simetria.

Estas operações formam, como já adiantamos anteriormente, um grupo. Um grupo, G, é definido como um conjunto de elementos $a, b, c, \ldots$ sujeitos aos seguintes postulados:

i) Existe a operação de multiplicação de dois elementos de tal forma que se $a \in G$ e $b \in G \Rightarrow ab = c$ onde $c \in G$. Note que $ab \neq ba$. Quando $ab = ba$ o grupo é dito *abeliano*.

ii) A multiplicação é associativa, isto é:
$$(ab)\,c = a\,(bc)$$

iii) Existe o elemento identidade, e, tal que $ae = ea = a$.

iv) Existe o elemento inverso para cada elemento $a \in G$, definido como a^{-1} tal que $aa^{-1} = a^{-1}a = e$.

As operações de rotação formam obviamente um grupo pois:

i) Duas rotações sucessivas (de ângulo θ_1 em torno de $\hat{\mathbf{n}}_1$ e θ_2 em torno de $\hat{\mathbf{n}}_2$) resultam em uma terceira rotação (de ângulo θ_3 em torno de $\hat{\mathbf{n}}_3$).

ii) Diferentes rotações podem ser associadas de maneiras distintas (mas sempre na mesma ordem).

iii) Existe a identidade.

iv) Para cada rotação existe a rotação inversa.

Se dado um certo espaço vetorial conseguirmos encontrar um conjunto de transformações T que goze das mesmas propriedades do grupo G, dizemos que o cunjunto T forma uma *representação* do grupo G. Um exemplo claro é o caso das rotações. Vamos considerar transformações lineares $R(\theta)$ que giram o vetor $\mathbf{r}$ de um ângulo θ em torno de um eixo $\hat{\mathbf{n}}$.

Dado o espaço vetorial euclideano com base $\{\hat{\mathbf{r}}_i\}$ temos $\mathbf{r} = \sum_i c_i \hat{\mathbf{r}}_i \Rightarrow R\mathbf{r} = \sum_i c_i R\hat{\mathbf{r}} = \sum_i \tilde{c}_i \hat{\mathbf{r}}_i$ onde $\tilde{c}_i$ são as componentes do vetor girado na base $\{\hat{\mathbf{r}}_i\}$. Tomando o produto escalar por $\hat{\mathbf{r}}_j$ temos

$$\tilde{c}_i = \sum_j R_{ij} c_j \text{ onde } R_{ij} = (\hat{\mathbf{r}}_i, R\hat{\mathbf{r}}_j) \qquad \text{(IV.5.1)}$$

Esta matriz pode ainda ser relacionada com a de mudança de base da seguinte forma. Consideremos uma nova base $\{\hat{\mathbf{v}}_i\}$ formada pela atuação de R sobre $\{\hat{\mathbf{r}}_i\}$, ou seja,

$$\hat{\mathbf{v}}_i = R\hat{\mathbf{r}}_i = \sum b_j\,(i)\,\hat{\mathbf{r}}_j$$

onde $b_j\,(i)$ é a j-ésima componente do novo i-ésimo vetor na base $\{\hat{\mathbf{r}}_i\}$. Mas como $\tilde{c}_k = \sum_j R_{kj} c_j$ temos para $c_j = \delta_{ij}$ o resultado $\tilde{c}_k = R_{ki}$, então

$$\hat{\mathbf{v}}_i = \sum_j R_{ji} \hat{\mathbf{r}}_j \quad \text{e} \quad R_{ji} = (\hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{v}}_i)$$

Expandindo $\mathbf{r}$ na nova base temos $\mathbf{r} = \sum_i c'_i \hat{\mathbf{v}}_i$ o que implica em

$$\begin{aligned}
\mathbf{r} &= \sum_i c'_i \hat{\mathbf{v}}_i \\
&= \sum_i c'_i \sum_j R_{ji} \hat{\mathbf{r}}_j \\
&= \sum_j \left(\sum_i R_{ji} c'_i \right) \hat{\mathbf{r}}_j
\end{aligned}$$

que por sua vez é igual a $\sum_j c_j \hat{\mathbf{r}}_j$

$$\Rightarrow c_j = \sum_i R_{ji} c'_i$$

ou

$$c'_i = \sum_j R^{-1}_{ij} c_j$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{S_{ij} = R^{-1}_{ij}}_{S_{ij}-\text{matriz de mudança de base}} \quad \text{(IV.5.2)}$$

As matrizes R_{ij} assim formadas obedecem a todos os postulados de um grupo e formam, portanto, uma representação do grupo de rotações no espaço euclideano.

Se o espaço considerado for um espaço de Hilbert formado por kets $|\psi\rangle$ podemos encontrar a representação do grupo de rotações neste espaço usando que $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ e

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(R^{-1}\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad U = \exp -\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L})\theta.$$

Em caso contrário devemos usar que os valores médios das componentes de operadores vetoriais transformam-se como

$$\langle v'_i \rangle = \sum_j R_{ij} \langle v_j \rangle \quad \text{(IV.5.3)}$$

e que $\langle v'_i \rangle = \langle \psi' | v_i | \psi' \rangle$ e $\langle v_j \rangle = \langle \psi | v_j | \psi \rangle$ onde $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$. Então, $U^\dagger v_i U = \sum_j R_{ij} v_j$ e $U = \exp -\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S})\,\theta$, como já vimos anteriormente. Portanto, no caso de produtos diretos de vários espaços de Hilbert as transformações que são as representações do grupo de rotações são da forma

$$U = \exp -\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J})\,\theta \quad \text{(IV.5.4)}$$

onde $\mathbf{J}$ =momentum angular total. No caso particular das rotações denotaremos o operador unitário U por D com elementos de matriz $\mathcal{D}_{ij} = \langle i | D | j \rangle$.

Se dois conjuntos de matrizes D e D' estão relacionados por uma transfomação de similaridade

$$D' = R^{-1} D R$$

as representações são ditas equivalentes. Em particular, quando as matrizes D podem ser escritas na forma (D é uma matriz $n \times n$)

$$D = \begin{pmatrix} D^{(1)} & 0 & & 0 \\ 0 & D^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & D^{(b)} \end{pmatrix} \quad \text{(IV.5.5)}$$

onde $D^{(i)}$ são as matrizes $n^{(i)} \times n^{(i)}$ e $\sum_i n^{(i)} = n$, e não há transformação de similaridade capaz de reduzí-la a novos blocos, diz-se que esta é uma representação irredutível do grupo de rotações.

Um exemplo que já nos é familiar é quando D representa uma rotação no espaço que é o produto direto $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$. Aqui, $D = D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ que, como já sabemos, reduz-se a

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \begin{pmatrix} D^{(j_1+j_2)} & 0 & & 0 \\ 0 & D^{(j_1+j_2-1)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & D^{(|j_1-j_2|)} \end{pmatrix}.$$

Para encontrar os elementos das matrizes de rotação devemos fazer uso das relações

$$\begin{aligned} J_z|\alpha jm\rangle &= m\,\hbar\,|\alpha jm\rangle \\ J_{(+)}|\alpha jm\rangle &= \sqrt{j\,(j+1)-m\,(m+1)}\,\hbar\,|\alpha jm+1\rangle \\ J_{(-)}|\alpha jm\rangle &= \sqrt{j\,(j+1)-m\,(m-1)}\,\hbar\,|\alpha jm-1\rangle \end{aligned} \quad \text{(IV.5.7)}$$

nos elementos de matriz

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(j)}_{mm'} &= \langle jm|D|jm'\rangle \\ &= \left\langle jm\left|e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}})\theta}\right|jm'\right\rangle \end{aligned} \quad \text{(IV.5.8)}$$

que só tem uma forma simples em casos particulares como, por exemplo, $\hat{\mathbf{n}} = (0,0,1) \Rightarrow \mathcal{D}^{(j)}_{mm'} = e^{-im\theta}\delta_{mm'}$.

Outra forma alternativa de representar uma rotação é através dos ângulos de Euler. Neste caso, ao invés de representarmos uma rotação de um vetor por um ângulo θ e um eixo $\hat{\mathbf{n}}$, podemos equivalentemente efetuar as seguintes etapas:

i) Rotação de α em torno do eixo $\hat{\mathbf{z}}$; $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}},\hat{\mathbf{z}} \to \hat{\mathbf{x}}',\hat{\mathbf{y}}',\hat{\mathbf{z}})$

ii) Rotação de β em torno do eixo $\hat{\mathbf{y}}'$; $(\hat{\mathbf{x}}',\hat{\mathbf{y}}',\hat{\mathbf{z}} \to \hat{\mathbf{x}}'',\hat{\mathbf{y}}',\hat{\mathbf{z}}')$

iii) Rotação de γ em torno do eixo $\hat{\mathbf{z}}'$; $(\hat{\mathbf{x}}'',\hat{\mathbf{y}}',\hat{\mathbf{z}}' \to \hat{\mathbf{x}}''',\hat{\mathbf{y}}'',\hat{\mathbf{z}}')$.

Por outro lado, sabemos que

$$J_{y'} = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}\,J_y\,e^{i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}$$

e ainda,

$$f\,(J_{y'}) = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}\,f\,(J_y)\;e^{i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}$$

o que significa que

$$e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_{y'}} = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}\,e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_y}\,e^{i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}.$$

Este mesmo raciocínio pode ser usado para a última rotação em torno de $\hat{\mathbf{z}}'$,

$$e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}J_{z'}} = e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_{y'}}\,e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}J_z}\,e^{i\frac{\beta}{\hbar}J_{y'}}.$$

Substituindo a penúltima fórmula na última e o resultado na expressão para D temos

$$D\,(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_y}e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}J_z}.$$

Em termos dos ângulos de Euler temos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(j)}_{mm'} &= \left\langle jm|\,e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}J_z}e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_y}e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}J_z}\,|jm'\right\rangle \\ &= e^{i\frac{\alpha}{\hbar}m}\,e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}m'}\,\left\langle jm|e^{-i\frac{\beta}{\hbar}J_y}|jm'\right\rangle \\ &\equiv e^{i\frac{\alpha}{\hbar}m}\,e^{-i\frac{\gamma}{\hbar}m'}\,d^{(j)}_{mm'}\,(\beta) \end{aligned} \quad \text{(IV.5.11)}$$

Os elementos de matriz $d^{(j)}_{mm'}\,(\beta)$ podem ser calculados como

$$d^{(j)}_{mm'}\,(\beta) = \sum_t (-1)^t\,\frac{[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{(j+m-t)!(j-m'-t)!\,t!\,(t+m'-m)!}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'-2t}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2t+m'-m}$$

A unitariedade das matrizes D é escrita como

$$D^\dagger D = DD^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{ou} \quad \sum_{m'}\mathcal{D}^{(j)*}_{mm'}\mathcal{D}^{(j)}_{nm'} = \delta_{mn}. \quad \text{(IV.5.13)}$$

No caso particular da representação $j = l$ temos $\langle \mathbf{r}|lm\rangle = Y_l^m(\theta,\varphi)$. Aplicando o operador de rotação sobre $|lm\rangle$ temos

$$|\widetilde{lm}\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(l)}_{m'm}|lm'\rangle \quad \text{(IV.5.14)}$$

$$\Rightarrow \langle \mathbf{r}|\widetilde{lm}\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(l)}_{m'm}\langle \mathbf{r}|lm'\rangle$$

ou

$$Y_l^m(\theta',\varphi') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\,\mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(R) \quad \text{(IV.5.15)}$$

Como $|lm\rangle$ é um auto estado de J_z, $|\widetilde{lm}\rangle$ será um auto estado do operador $J_{z'}$ onde z' é o novo eixo z. Usando a unitariedade de D temos

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)*}_{mm'}(R)\,Y_l^{m'}(\theta',\varphi').$$

Considerando um ponto genérico no novo eixo z' $(\theta' = 0)$ temos

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)*}_{mm'}(R)\,Y_l^{m'}(0,\varphi')$$

Mas como

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,(-1)^m e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)$$

temos

$$\begin{aligned}
Y_l^{m'}(0,\varphi') &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m')!}{(l+m')!}}\,(-1)^{m'} e^{im'\varphi'}P_l^{m'}(1) \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m'0} \\
\Rightarrow Y_l^m(\beta,\alpha) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathcal{D}^{(l)*}_{m0}(R) \\
\Rightarrow \mathcal{D}^{(l)}_{m0} &= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^{m*}(\beta,\alpha)
\end{aligned}$$

onde β e α são os ângulos esféricos do novo eixo z' no velho sistema. Então, aplicando na formula (IV.5.15) para $m = 0$ temos

$$Y_l^0(\theta',\varphi') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^{m'*}(\beta,\alpha)$$

ou

$$P_l(\cos\theta') = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m'} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\,Y_l^{m'*}(\beta,\alpha) \quad \text{(IV.5.16)}$$

que é o teorema da adição de harmônicos esféricos.

Para finalizar estes comentários genéricos sobre propriedades das matrizes de rotação vamos escrever a relação entre os elementos de matriz de $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ com os de $D^{(j)}$ obtida de $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$.

Vamos usar a identidade

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{mm'} |j_1j_2jm\rangle\langle j_1j_2jm|D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}|j_1j_2jm'\rangle\langle j_1j_2jm'|$$

Então

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{jmm'} |j_1j_2jm\rangle\langle j_1j_2jm'|\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}$$

Tomando os elementos de matriz na base $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ temos

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} | j_1 j_2 m_1' m_2' \rangle = \sum_{jmm'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \langle j_1 j_2 j m' | j_1 j_2 m_1' m_2' \rangle \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}$$

mas como

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} | j_1 j_2 m_1' m_2' \rangle = \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'} \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}$$

temos

$$\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'} \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{mm'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | j_1 j_2 j m' \rangle \mathcal{D}^{(j)}_{mm'} \quad \text{(IV.5.17)}$$

onde usamos que os CG's são reais. Podemos ainda multiplicar ambos os lados desta expressão por $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle$ e somar sobre m_1 e m_2. Como

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle j_1 j_2 j m | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \delta_{jj_3} \delta_{mm_3},$$

temos

$$\sum_{m_1 m_2} \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'} = \sum_{m'} \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | j_1 j_2 j_3 m' \rangle \mathcal{D}^{(j_3)}_{m_3 m'}.$$

Multiplicando os dois lados por $\mathcal{D}^{(j_1)*}_{m_1'' m_1'}$ e somando em m_1' obtém-se

$$\sum_{m_1 m_2 m_1'} \mathcal{D}^{(j_1)*}_{m_1'' m_1'} \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'} \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \sum_{m' m_1'} \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | j_1 j_2 j_3 m' \rangle \mathcal{D}^{(j)}_{m_3 m'} \mathcal{D}^{(j_1)*}_{m_1'' m_1'}.$$

Finalmente, usando a unitaridade de D e renomeando os índices de soma temos

$$\sum_{m_2'} \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2' m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2' | j_1 j_2 j_3 \, m_3 \rangle = \sum_{m' m_1'} \langle j_1 j_2 m_1' m_2 | j_1 j_2 j_3 \, m' \rangle \mathcal{D}^{(j_3)}_{m_3 m'} \mathcal{D}^{(j_1)*}_{m_1 \, m_1'}, \quad \text{(IV.5.18)}$$

que será extremamente útil mais adiante.

De posse destes resultados sobre representações do grupo de rotações podemos estudar elementos de matriz de operadores tensoriais através do teorema de Wigner-Eckart que iremos abordar abaixo.

Tensores e Operadores Tensoriais

Um tensor $T_{ijkl\ldots n}$ é, por definição, um objeto que se transforma como

$$T'_{ijk\ldots n} = \sum_{i'j'\ldots n'} a_{ii'} a_{jj'} a_{kk'} \ldots a_{nn'} T_{i'j'k'\ldots n'} \quad \text{(IV.5.19)}$$

quando giramos o sistema de coordenadas (mudança de base).

Os coeficientes $a_{ii'}$ são os elementos da matriz de mudança de base (R_{ij} no caso de rotações). Note que a definição acima é uma generalização da transformada de um vetor $v_i' = \sum_j a_{ij} v_j$. Em particular, o vetor posição tranforma-se como

$$x_i' = \sum_j a_{ij} x_j.$$

Como exemplo de tensor podemos mencionar os momentos de inércia das massas de um sistema de partículas

$$M_{ij} = \sum_\alpha m_\alpha x_{\alpha i} x_{\alpha j}$$

que quando sujeito a uma mudança de base escreve como

$$\begin{aligned} M'_{ij} &= \sum_\alpha m_\alpha x'_{\alpha i} x'_{\alpha j} \\ &= \sum_\alpha m_\alpha \sum_k a_{ik} x_{\alpha k} \sum_l a_{jl} x_{\alpha l} \\ &= \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} \sum_\alpha m_\alpha x_{\alpha k} x_{\alpha l} \\ &= \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} M_{kl} \end{aligned}$$

$\Rightarrow M_{ij}$ é um tensor.

Um tensor é dito de "posto p" (rank p) quando existem p direções a ele associadas (p índices). Por exemplo, o tensor de momento das massas é de posto 2 e atua no espaço tridimensional.

Vamos agora considerar as nove componentes de um tensor de posto 2 em 3-D e formar as seguintes combinações.

i) $\sum_k T_{kk} \rightarrow$ traço do tensor

ii) $T_{ij}^{(S)} = \frac{T_{ij}+T_{ji}}{2} - \frac{1}{3}\delta_{ij} \sum_k T_{kk} \rightarrow$ tensor simétrico de traço nulo

iii) $T_{ij}^{(A)} = \frac{T_{ij}-Tji}{2} \rightarrow$ tensor antissimétrico

i), ii) e iii) $\rightarrow$ (IV.5.20)

Quando efetuamos uma mudança de base temos

$$(\sum_k T_{kk})' = \sum_k \sum_{ij} \underbrace{a_{ki} a_{kj}}_{\delta_{ij}} T_{ij}$$

onde usamos que a transformação é ortogonal. Então vemos que $\sum_k T_{kk}$ não varia quando sujeito a rotações $\Rightarrow \sum_k T_{kk} = \mathrm{tr}T$ é um escalar.

Já $T_{ij}^{(S)}$ transforma-se como

$$\begin{aligned} T_{ij}^{(S)\prime} &= \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} \left[\frac{T_{kl} + T_{lk}}{2} - \frac{1}{3}\delta_{kl} \sum_n T_{nn} \right] \\ &= \frac{T'_{ij}}{2} + \frac{T'_{ji}}{2} - \frac{1}{3}\delta_{ij} \sum_n T'_{nn} \end{aligned}$$

que é o tensor simétrico de traço nulo formado pelas componentes do tensor transformado.

Finalmente, T_{ij}^A transforma-se como

$$\begin{aligned} T_{ij}^{(A)\prime} &= \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} \left[\frac{T_{kl} - T_{lk}}{2} \right] \\ &= \frac{T'_{ij} - T'_{ji}}{2} \end{aligned}$$

que é o tensor antissimétrico formado pelas componentes do tensor transformado.

Neste caso vemos que o traço de T, as três componente independentes de $T_{ij}^{(A)}$ e as cinco componentes independentes de $T_{ij}^{(S)}$ transoformam-se segundo as representações irredutíveis $D^{(0)}$, $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ (respectivamente) do grupo de rotações. Lembrando que

$$\begin{aligned} |\widetilde{lm}\rangle &= \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(l)} |lm'\rangle \\ \Rightarrow Y_l'^m(\theta,\varphi) &= \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(l)} Y_l^{m'}(\theta,\varphi) \quad \text{(IV.5.21)} \end{aligned}$$

ou seja, os harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta,\varphi)$ também transformam-se segundo representações irredutíveis do grupo de rotações. Podemos definir um tensor esférico T_k^q, $q = k, k-1, \ldots, -k$, como um conjunto de elementos que, segundo rotações, se transformam como

$$\tilde{T}_k^q = \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^{(k)} T_k^{q'} \quad \text{(IV.5.22)}$$

Produtos de tensores:

Dados dois vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ em 3-D, podemos formar um tensor cartesiano com as nove componentes $a_i b_j$ que se transformam de acordo com a representação $D^{(1)} \otimes D^{(1)}$ do grupo de rotações.

Como já vimos, o tensor $a_i b_j$ dá origem a 3 tensores irredutíveis; $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$ (escalar), $\mathbf{a}\times\mathbf{b}$ (tensor antissimétrico) e $\frac{(a_i b_j + a_j b_i)}{2} - \frac{1}{3}\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\delta_{ij}$ (tensor simétrico de traço nulo) que corresponde à redução

$$D^{(1)} \otimes D^{(1)} = D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(0)} \quad \text{(IV.5.23)}$$

Se tivermos um 3º vetor, $\mathbf{c}$, o tensor de posto 3 formado por $a_i b_j c_k$ transforma-se de acordo com $D^{(1)} \otimes D^{(1)} \otimes D^{(1)}$ que pode ser reduzida a

$$\begin{aligned} D^{(1)} \otimes D^{(1)} \otimes D^{(1)} &= D^{(1)} \otimes \left(D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(0)}\right) \\ &= D^{(1)} \otimes D^{(2)} \oplus D^{(1)} \otimes D^{(1)} \oplus D^{(1)} \otimes D^{(0)} \\ &= D^{(3)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(0)} \oplus D^{(1)} \\ &= D^{(3)} \oplus 2D^{(2)} + 3D^{(1)} + D^{(0)} \quad \text{(IV.5.24)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow a_i b_j c_k \text{ gera } \begin{cases} \text{1 escalar} \\ \text{3 vetores} \\ \text{2 tensores simétricos de traço nulo (posto 2)} \\ \text{1 tensor irredutível de posto 3} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ nº componentes $= 1 + 3\times 3 + 2\times 5 + 7 = 27$.

Como exemplos temos o escalar $(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot\mathbf{c}$ e os 3 vetores $(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\,\mathbf{b}$, $(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\,\mathbf{c}$ e $(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})\,\mathbf{a}$.

No caso de tensores esféricos, se temos R_k^q, de posto k, e $S_{k'}^{q'}$, de posto k', o produto $R_k^q S_{k'}^{q'}$ se transforma de acordo com a representação $D^{(k)} \otimes D^{(k')}$ do grupo de rotações. Esta representação é redutível e a sua redução nos dá tensores irredutíveis

$$T_K^Q(k,k') = \sum_{qq'} \langle k,k',q,q'|k,k',K,Q\rangle\, R_k^q S_{k'}^{q'} \quad \text{(IV.5.25)}$$

onde $K = k+k', k+k'-1, \ldots, |k-k'|$ e $Q = K, K-1, \ldots, -K$.

Operadores tensoriais

Como já vimos em várias situações, o operador vetorial cartesiano, $\mathbf{A}$, é tal que

$$\langle A_i\rangle' = \sum R_{ij}\,\langle A_j\rangle$$

onde $\langle A_i\rangle' = \langle\psi'|A_i|\psi'\rangle$ e $\langle A_j\rangle = \langle\psi|A_j|\psi\rangle$. Como $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ temos

$$\left\langle\psi|U^\dagger A_i U|\psi\right\rangle = \langle\psi|\sum_j R_{ij}A_j|\psi\rangle$$

ou

$$U^\dagger A_i U = \sum_j R_{ij}A_j$$

Multiplicando à esquerda por U e à direita por $U^\dagger$ temos $A_i = \sum\limits_j R_{ij}UA_jU^\dagger$. Usando que $R_{ij}^{-1} = R_{ji}$ temos

$$\begin{aligned}\sum_k R_{ki}^{-1}A_i &= \sum_{ijk} R_{ki}^{-1}R_{ij}UA_jU^\dagger \\ &= UA_kU^\dagger\end{aligned}$$

ou

$$UA_kU^\dagger = \sum_i R_{ik}A_i \quad \text{(IV.5.26)}$$

Lembrando que um tensor esférico transforma-se como

$$\tilde{T}_k^q = \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^{(k)} T_k^{q'}$$

e que o operador transformado $\tilde{A} = UAU^\dagger$ podemos definir um operador tensorial como aquele que se transforma perante rotações como

$$\begin{aligned}\tilde{T}_k^q &= UT_k^qU^\dagger \\ &= \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^k(R)\, T_k^{q'} \quad \text{(IV.5.27)}\end{aligned}$$

(lembre-se que $D \equiv U$).

Seja, então, D, uma tranformação infinitesinal (rotação) em torno de um certo eixo; $D = \mathbb{1} - \frac{i\alpha J_\lambda}{\hbar}$. Desta forma temos

$$\left(1 - i\frac{\alpha J_\lambda}{\hbar}\right) T_k^q \left(1 + i\frac{\alpha J_\lambda}{\hbar}\right) = \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^k T_k^{q'}$$

onde

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{q'q}^k &= \langle kq'|\mathbb{1} - \frac{i\alpha J_\lambda}{\hbar}|kq\rangle \\ &= \delta_{qq'} - i\frac{\alpha}{\hbar}\langle kq'|J_\lambda|kq\rangle\end{aligned}$$

$$T_k^q - \frac{i\alpha}{\hbar}J_\lambda T_k^q + \frac{i\alpha}{\hbar}T_k^qJ_\lambda + \ldots = T_k^q - \frac{i\alpha}{\hbar}\sum_{q'} T_k^{q'}\langle kq'|J_\lambda|kq\rangle$$

ou

$$J_\lambda T_k^q - T_k^qJ_\lambda = \sum_{q'} T_k^{q'}\langle kq'|J_\lambda|kq\rangle$$

Se fizermos $\lambda = z$ temos

$$\begin{aligned}J_zT_k^q - T_k^qJ_z &= \sum_{q'} T_k^{q'}\langle kq'|J_z|kq\rangle \\ &= \hbar q T_k^q\end{aligned}$$

enquanto que para $\lambda = \pm$ temos

$$J_{(\pm)}T_k^q - T_k^qJ_{(\pm)} = \sqrt{k(k+1) - (q\pm 1)\,q}\,\hbar T_k^{q\pm 1}$$

Então os operadores tensoriais são tais que

$$[J_z, T_k^q] = \hbar q T_k^q \qquad \text{e} \qquad \left[J_{(\pm)}, T_k^q\right] = \hbar\sqrt{k\,(k+1) - q\,(q \pm 1)}T_k^{q\pm 1} \quad \text{(IV.5.28)}$$

Exemplos:

i) Consideremos o operador vetorial cartesiano $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$. Como uma rotação em torno do eixo z não altera a componente z, temos $[J_z, A_z] = 0$. Por outro lado, como $\left[A_1^0, J_z\right] = 0$ devemos ter $A_1^0 = A_z$. Pela 2ª relação de comutação temos

$$\begin{array}{c} \left[J_{(+)}, A_1^0\right] = \left[J_x, A_1^0\right] + i\left[J_y, A_1^0\right] = \hbar\sqrt{2}A_1^1 \\ \left[J_{(-)}, A_1^0\right] = \left[J_x, A_1^0\right] - i\left[J_y, A_1^0\right] = \hbar\sqrt{2}A_1^{-1} \end{array} \quad \text{(IV.5.29)}$$

Mas as relações de comutação $[J_x, A_z]$ e $[J_x, A_z]$ podem ser obtidas através de (IV.5.26) se efetuarmos rotações infinitesimais em torno dos eixos $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ e $\hat{\mathbf{z}}$;

$$R^{(z)}(\epsilon) = \begin{bmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ +\epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \; R^{(x)}(\epsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 \end{bmatrix} \text{ e } R^{(y)}(\epsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Podemos, então, escrever

$$\left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}J_\lambda\right) A_k \left(1 + i\frac{\epsilon}{\hbar}J_\lambda\right) = \sum_l R_{lk}^{(\lambda)}(\epsilon)\, A_l$$

(onde $\lambda = x, y$ ou z e os elementos de matriz estão dados acima)

para concluir que

$$\left.\begin{array}{lll} [A_x, J_y] = i\hbar A_z; & [A_x, J_z] = -i\hbar A_y; & [A_x, J_x] = 0 \\ [A_y, J_z] = i\hbar A_x; & [A_y, J_x] = -i\hbar A_z; & [A_y, J_y] = 0 \\ [A_z, J_x] = i\hbar A_y; & [A_z, J_y] = -i\hbar A_x; & [A_z, J_z] = 0 \end{array}\right\} \text{(IV.5.30)}$$

que sustituidas em (IV.5.29) nos dão

$$A_1^0 = A_z, \qquad A_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + iA_y) \qquad \text{e} \qquad A_1^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x - iA_y)$$

ii) Seja agora T_{ij} um tensor formado por $A_i B_j$ onde $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ são vetores em 3-D. Vamos, então, calcular as componentes do operador $T_2^q = \sum_{mn} A_m B_n \langle 11mn|112q\rangle$ onde $m, n = 0, \pm 1$.

Lembrando que $\langle 1111|1122\rangle = 1$ temos $T_2^2 = A_1 B_1$.

Usando as relações de comutação (IV.5.28) temos

$$\begin{aligned} T_2^1 &= \frac{1}{2\hbar}\left[J_{(-)}, A_1 B_1\right] \\ &= \frac{1}{2\hbar}\left(\left[J_{(-)}, A_1\right] B_1 + A_1\left[J_{(-)}, B_1\right]\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(A_0 B_1 + A_1 B_0\right) \\ T_2^0 &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar}\left[J_{(-)}, T_2^1\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar\sqrt{2}}\left(\left[J_{(-)}, A_0 B_1\right] + \left[J_{(-)}, A_1 B_0\right]\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(3A_z B_z - \mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\right) \quad \text{(IV.5.32)} \end{aligned}$$

E assim, aplicando sucessivamente a relação de comutação $\left[J_{(-)}, T_k^q\right]$, podemos gerar todos os T_k^q para $q = k, \ldots, -k$.

Elementos de matriz de operadores tensoriais e o teorema de Wigner-Eckart

Em diversas circunstâncias estaremos interessados em estudar elementos de matriz de operadores tensoriais entre diferentes autoestados dos operadores J^2 e J_z, $|\alpha jm\rangle$ e $|\alpha' j' m'\rangle$, onde $\alpha\,(\alpha')$ simboliza a totalidade dos demais números quânticos necessários para especificar o estado do sistema. Então queremos computar $\langle \alpha jm|T_k^q|\alpha' j' m'\rangle$.

Como sabemos, $UT_k^q U^\dagger = \sum\limits_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^k T_k^{q'}$, o que implica em

$$\langle \alpha jm|UT_k^q U^\dagger|\alpha' j' m'\rangle = \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^k \langle \alpha jm|T_k^{q'}|\alpha' j' m'\rangle.$$

Mas, como $U|\alpha jm\rangle = \sum\limits_{\mu} \mathcal{D}_{\mu m}^j |\alpha j\mu\rangle$ podemos usar que

$$\sum_m \mathcal{D}_{\mu' m}^{j*} \mathcal{D}_{\mu m}^j = \delta_{\mu\mu'}$$

e escrever

$$\sum_m \mathcal{D}_{\mu' m}^{j*} U|\alpha jm\rangle = |\alpha j\mu'\rangle,$$

que se operada à esquerda por $U^\dagger$ nos dá

$$\sum_m \mathcal{D}_{\mu' m}^{j*} |\alpha jm\rangle = U^\dagger|\alpha j\mu'\rangle.$$

Então, $U^\dagger|\alpha jm\rangle = \sum\limits_{\mu} \mathcal{D}_{m\mu}^{j*}|\alpha j\mu\rangle$ ou $\langle \alpha jm|U = \sum\limits_{\mu} \mathcal{D}_{m\mu}^j \langle \alpha j\mu|$, e, portanto,

$$\begin{aligned}
\langle \alpha jm|UT_k^q U^\dagger|\alpha' j' m'\rangle &= \sum_{\mu\mu'} \mathcal{D}_{m\mu}^j \mathcal{D}_{m'\mu'}^{j'*} \langle \alpha j\mu|T_k^q|\alpha' j' \mu'\rangle \\
&= \sum_{q'} \mathcal{D}_{q'q}^k \langle \alpha jm|T_k^{q'}|\alpha' j' m'\rangle
\end{aligned}$$

Comparando esta última expressão com a (IV.5.18) através das identificações $j' \to j_1$, $k \to j_2$ e $j \to j_3$ podemos concluir que os elementos de matriz dos operadores tensoriais devem ser proporcionais aos C.G.s presentes naquela expressão:

$$\langle \alpha jm|T_k^q|\alpha' j' m'\rangle \equiv \langle \alpha j||T_k||\alpha' j'\rangle \langle kj'jm|kj'qm'\rangle, \quad \text{(IV.5.33)}$$

que é o conhecido *teorema de Wigner-Eckart*.

Esta fórmula deixa explícito o fato que todo o caráter "direcional" do elemento de matriz está contido no C.G. $\langle kj'jm|kj'qm'\rangle$ enquanto que a dinâmica está contida no chamado *elemento de matriz reduzido* que denotamos por $\langle \alpha j||T_k||\alpha' j'\rangle$. Nesta notação está claro que este termo independente de m, m' ou q, ou seja, $\langle \alpha j||T_k||\alpha' j'\rangle$ depende exclusivamente da origem deste operador tensorial e não das suas características de transformação por rotações.

A 1ª consequência imediata deste teorema são as regras de seleção. Para que os C.G.'s sejam não nulos devemos ter

$$q + m' = m \Rightarrow m - m' \equiv \Delta m = q$$

e

$$|j - j'| \leq k \leq j + j'$$

Em particular, para operadores escalares, T_0^0, devemos ter $m' = m$ e $j' = j$ enquanto que para operadores vetoriais, T_1^q $(q = 1, 0, -1)$, temos obviamente $\Delta m = 0, \pm 1$ e $\Delta j \equiv j - j' = 0, \pm 1$ excluindo $j = j' = 0$, por razões óbvias.

Exemplos de operadores tensoriais são os momentos estáticos da distribuição de carga em um átomo ou em um núcleo. Uma partícula carregada, longe das fontes, sente um potencial $\phi\,(\mathbf{r})$ que pode ser expandido como

$$\phi\,(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{Q_{lm}^*}{r^{l+1}} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

onde Q_{lm} é dado por

$$Q_{lm} = \int \rho\,(\mathbf{r}')\, r'^l Y_l^m\,(\theta', \varphi')\, d^3r'. \quad \text{(IV.5.33)}$$

A cada valor de k temos $2k+1$ componentes m do tensor esférico de posto k, $r^k Y_k^m$, que representa o momento de 2^k - polo elétrico.

O teorema de Wigner-Eckart nos permite calcular parcialmente os elementos de matriz destes operadores como veremos mais tarde em teoria de perturbações.

Elementos de matriz de um operador vetorial

Estamos interessados em calcular $\langle a'j'm'|A^q|\alpha jm\rangle$. Nosso ponto de partida é notar que pelo teorema WE temos

$$\frac{\langle\alpha'j'm'|A^q|\alpha jm\rangle}{\langle\alpha'j'||\mathbf{A}||\alpha j\rangle} = \frac{\langle\alpha'j'm'|J^q|\alpha jm\rangle}{\langle\alpha'j'||\mathbf{J}||\alpha j\rangle} \quad \text{(mesmo C.G.)} \quad \text{(IV.5.34)}$$

Por outro lado WE nos diz que

$$\langle\alpha'jj|J_z|\alpha jj\rangle = \langle j1j0|j1jj\rangle\langle\alpha'j||\mathbf{J}||\alpha j\rangle$$

ou

$$\begin{aligned} \hbar j\delta_{\alpha\alpha'} &= \sqrt{\frac{j}{j+1}}\langle\alpha'j||\mathbf{J}||\alpha j\rangle \\ \Rightarrow \langle\alpha'j'||\mathbf{J}||\alpha j\rangle &= \sqrt{j\,(j+1)}\hbar\delta_{jj'}\delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned}$$

pois quando $j \neq j'$ $\langle\alpha'j'm|J_z|\alpha jm\rangle = 0$. Então,

$$\langle\alpha'j'm|A^q|\alpha jm\rangle = \frac{\langle\alpha'j||\mathbf{A}||\alpha j\rangle}{\sqrt{j\,(j+1)}\hbar}\langle\alpha'jm'|J^q|\alpha jm\rangle \quad \text{(IV.5.35)}$$

quando $j = j'$, mas nada podemos dizer quando $j \neq j'$ (indeterminação do lado direito de (IV.5.34)). Para $j = j'$ a (IV.5.35) pode ser simplificada se usarmos que

$$\langle\alpha'jm'|\mathbf{J}\cdot\mathbf{A}|\alpha jm\rangle = c\langle\alpha'j||\mathbf{A}||\alpha j\rangle$$

devido ao fato de $\mathbf{J}\cdot\mathbf{A}$ ser um operador escalar e às propriedades do operador $\mathbf{J}$. Como c deve ser independente da natureza de $\mathbf{A}$ podemos fazer $\mathbf{A} = \mathbf{J}$ para obter

$$\begin{aligned} c &= \sqrt{j\,(j+1)}\hbar \\ \Rightarrow \langle\alpha'j||\mathbf{A}||\alpha j\rangle &= \frac{\langle\alpha',j,m|\mathbf{J}\cdot\mathbf{A}|\alpha,j,m\rangle}{\hbar\sqrt{j\,(j+1)}} \end{aligned}$$

e a (IV.5.35) escreve-se como

$$\langle\alpha'jm'|A^q|\alpha jm\rangle = \frac{\langle\alpha'jm'|\mathbf{J}\cdot\mathbf{A}|\alpha jm\rangle}{j\,(j+1)\,\hbar^2}\langle\alpha'jm'|J^q|\alpha jm\rangle \quad \text{(IV.5.36)}$$

Uma aplicação imediata desta fórmula é o cálculo do momento magnético de um átomo. Como sabemos

$$\mu = -\frac{e}{2mc}\left(g_l\mathbf{L} + g_s\mathbf{S}\right)$$

e $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. O momento magnético do átomo é dado pela projeção máxima de μ na direção $\hat{\mathbf{z}}$ (para um dado j), ou seja $\mu = \langle\alpha jj|\mu_z|\alpha jj\rangle$. Então, pela fórmula (IV.5.36) teremos

$$\begin{aligned} \mu &= \langle\alpha jj|\mu_z|\alpha jj\rangle \\ &= -\frac{e}{2mc\hbar\,(j+1)}\langle\alpha jj|g_l\mathbf{L}\cdot\mathbf{J} + g_s\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}|\alpha jj\rangle. \end{aligned}$$

Mas, $\mathbf{L}\cdot\mathbf{J} = \frac{1}{2}\left(J^2 + L^2 - S^2\right)$ e $\mathbf{S}\cdot\mathbf{J} = \frac{1}{2}\left(J^2 + S^2 - L^2\right)$

$$\Rightarrow \mu = -\frac{e}{4mc\hbar\,(j+1)}\langle\alpha jj|\left(g_l + g_s\right)J^2 + \left(g_l - g_s\right)\left(L^2 - S^2\right)|\alpha jj\rangle$$

Quando o estado fundamental do átomo depende do acoplamento $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$, $|\alpha jj\rangle$ é um auto estado de L^2 e S^2. Então, como $g_l \approx 1$ e $g_s \approx 2$ temos

$$\mu = -\frac{e\hbar j}{2mc}\underbrace{\left[1 + \frac{j\,(j+1) - l\,(l+1) + s\,(s+1)}{2j\,(j+1)}\right]}_{\text{fator } g \text{ de Landé para acoplamento } \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}}.$$

O momento angular, operadores tensoriais e a inversão temporal

Como já vimos anteriormente os operadores de posição e momento linear transformam-se segundo inversão temporal como

$$T\mathbf{r}T^{-1} = \mathbf{r} \qquad \text{e} \qquad T\mathbf{p}T^{-1} = -\mathbf{p},$$

o que nos leva naturalmente a

$$T\mathbf{L}T^{-1} = T(\mathbf{r}\times\mathbf{p})T^{-1} = T\mathbf{r}T^{-1}\times T\mathbf{p}T^{-1} = -\mathbf{L}.$$

Podemos ainda mostrar que esta transformação não é apenas válida no caso do momento angular orbital. No caso mais geral queremos mostrar que esta lei de transformação é válida para o gerador das rotações $\mathbf{J}$. Para tal, devemos exigir que, a exemplo do que ocorre para a posição e o momento linear, a inversão temporal não altera o procedimento da quantização canônica, o que no caso do momento angular $\mathbf{J}$ se reflete através da preservação dos comutadores de suas componentes. Assim, usando a antiunitariedade de T, devemos ter

$$T(\mathbf{J}\times\mathbf{J})T^{-1} = T\mathbf{J}T^{-1}\times T\mathbf{J}T^{-1} = T(i\hbar\mathbf{J})T^{-1} = -i\hbar T\mathbf{J}T^{-1} = i\hbar T\mathbf{J}T^{-1},$$

que só pode ser satisfeita se $T\mathbf{J}T^{-1} = -\mathbf{J}$.

No caso do momento angular orbital podemos também estudar como a parte angular das funções de onda se transformam por inversão temporal. Neste caso podemos ecrever

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

que sob a atuação de T nos leva a

$$T|\psi\rangle = \int d^3r'T|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle^* = \int d^3x'|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle^*,$$

onde convencionamos que $T|\mathbf{r}'\rangle = |\mathbf{r}'\rangle$ (fase da transformação $= 1$). Então recuperamos o procedimento da conjugação complexa $\psi(\mathbf{r}') \to \psi^*(\mathbf{r}')$ que é necessária para que a equação de Schrödinger fique invariante sob inversão temporal. Por outro lado sabemos que a parte angular da função de onda é dada pelo harmônico esférico $Y_l^m(\theta,\varphi)$, cuja conjugação complexa nos leva a

$$Y_l^m(\theta,\varphi) \to Y_l^{m*}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\varphi).$$

Como $Y_l^m(\theta,\varphi) = \langle\mathbf{r}|l,m\rangle$ concluímos que

$$T|l,m\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle. \qquad \text{(IV.5.37)}$$

Este resultado implica em que correntes que geram a componente z do momento angular orbital invertam o seu sentido sob inversão temporal, o que é um resultado fisicamente esperado.

Vamos agora estudar como se transformam os spinores de $s = 1/2$. Como vimos ao longo deste curso o autoestado de $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ com autovalor $\hbar/2$ é dado por

$$|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}\; e^{-iS_y\beta/\hbar}|+\rangle$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é caracterizado pelos ângulos polar, β, e azimutal α e $|+\rangle$ é o autoestado de S_z com autovalor $\hbar/2$. Atuando com T neste estado temos

$$T|\hat{\mathbf{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}\; e^{-iS_y\beta/\hbar}T|+\rangle = \eta|\hat{\mathbf{n}};-\rangle,$$

onde usamos que $T\mathbf{J}T^{-1} = -\mathbf{J}$. Por outro lado temos

$$|\hat{\mathbf{n}};-\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}\; e^{-iS_y(\beta+\pi)/\hbar}|+\rangle.$$

Comparando as duas últimas expressões concluímos que

$$T = \eta e^{-i\pi S_y/\hbar}K = -i\eta\left(\frac{2S_y}{\hbar}\right)K$$

onde a presença de K significa que a aplicação de T envolve uma conjugação complexa. Evidentemente $K|+\rangle = |+\rangle$ e é fácil mostrar que

$$e^{-i\pi S_y/\hbar}|+\rangle = +|-\rangle \qquad \text{e} \qquad e^{-i\pi S_y/\hbar}|-\rangle = -|+\rangle.$$

Desta forma temos

$$T(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = \eta c_+^*|-\rangle - \eta c_-^*|+\rangle$$

e, consequentemente,

$$T^2(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = -|\eta|^2 c_+|+\rangle - |\eta|^2 c_-|-\rangle = -(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle)$$

que implica em $T^2 = -1$, independentemente da escolha da fase η. Note que este resultado contrasta com (IV.5.37) que implica em $T^2 = 1$.

De forma geral podemos mostrar que

$$T^2|j\,\text{semi-inteiro}\rangle = -|j\,\text{semi-inteiro}\rangle \qquad \text{e} \qquad T^2|j\,\text{inteiro}\rangle = +|j\,\text{inteiro}\rangle$$

o que significa que os autovalores de T^2 são da forma $(-1)^{2j}$.

Para mostrar este resultado vamos generalizar o operador de inversão temporal para $T = \eta e^{-i\pi J_y/\hbar}K$. Assim, atuando com o operador T duas vezes teremos

$$T\left(T\sum|jm\rangle\langle jm|\psi\rangle\right) = T\left(\eta\sum e^{-i\pi J_y/\hbar}|jm\rangle\langle jm|\psi\rangle^*\right) = |\eta|^2 e^{-2i\pi J_y/\hbar}\sum|jm\rangle\langle jm|\psi\rangle.$$

Como $|\eta|^2 = 1$ e

$$e^{-2i\pi J_y/\hbar}|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle$$

temos o resultado desejado.

Note que este resultado implica que um sistema composto por um número par (ímpar) de partículas de spin semi-inteiro é sempre par (ímpar) sob a ação de T^2, independentemente da sua configuração.

Outro ponto importante concerne a convenção a ser usada para a fase da atuação de T sobre um estado $|j,m\rangle$. Em analogia com a convenção adotada no caso dos harmônicos esféricos em (IV.5.37) deveríamos ter

$$T|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m\rangle$$

no caso de j inteiro, independentemente de se referir ou não ao momento angular orbital. O problema é que essa expressão só poderia ser generalizada para o caso semi-inteiro caso a fase η fosse escolhida como i. No caso geral uma possível escolha seria

$$T|j,m\rangle = (i)^{2m}|j,-m\rangle,$$

que valeria tanto para j inteiro como semi-inteiro. Entretanto essa escolha não é a única adotada na literatura.

Uma vez analisado o comportamento dos autoestados do momento angular por inversão temporal, podemos passar ao estudo da transformação dos valores médios de observáveis por esta transformação. Como os autoestados do momento angular podem ser pares ou ímpares por inversão temporal temos

$$\langle\alpha,j,m|A|\alpha,j,m\rangle = \pm\langle\alpha,j,-m|A|\alpha,j,-m\rangle.$$

Se A é um tensor esférico A_k^q, pelo teorema de Wigner-Eckart precisamos investigar apenas a sua componente $q = 0$. A_k é par ou ímpar sob inversão temporal dependendo de como a sua componente $q = 0$ se comporta perante esta transformação. Por exemplo,

$$TA_k^0T^{-1} = \pm A_k^0.$$

Então,

$$\langle\alpha,j,m|A_k^0|\alpha,j,m\rangle = \pm\langle\alpha,j,-m|A_k^0|\alpha,j,-m\rangle.$$

Mas, como $|\alpha,j,-m\rangle = \mathcal{D}(0,\pi,0)|\alpha,j,m\rangle$ a menos de uma fase, podemos usar a (IV.5.27) para escrever

$$\mathcal{D}^*(0,\pi,0)\,A_k^0\,\mathcal{D}(0,\pi,0) = (-1)^k A_k^0 + (\text{componentes de } q \neq 0\,)$$

onde usamos que $\mathcal{D}_{00}(0,\pi,0) = P_k(\cos\pi) = (-1)^k$ e separamos as componentes $q \neq 0$ por terem seus valores médios nos os estados $|\alpha,j,m\rangle$ nulos. Como resultado final temos,

$$\langle\alpha,j,m|A_k^0|\alpha,j,m\rangle = \pm(-1)^k\langle\alpha,j,m|A_k^0|\alpha,j,m\rangle.$$

Segundo este resultado, como o operador posição é tal que $k = 1$, teríamos $\langle\mathbf{r}\rangle = 0$. Isto seria o esperado no caso da média ter sido efetuada em autoestados de paridade, o que não significa necessariamente ser o nosso caso onde $|j,m\rangle$ poderia ser, por exemplo, $c_s|s_{1/2}\rangle + c_p|p_{1/2}\rangle$, um estado de paridade indefinida.