Mecânica Quântica

Propriedades Gerais do Momento Angular em M.Q.

Autor: José Renato Alcarás

Sumário

1. Considerações Iniciais

A maior parte desse trabalho encontra-se no livro “Quantum Mechanics”, dos autores Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë, traduzido para o inglês do francês por Susan Reid Hemley, Nicole Ostrowsky e Dan Ostrowsky. Meu trabalho aqui foi o de traduzir e sumarizar as informações do capítulo 6, *General properties of angular momentum in quantum mechanics*. Constantes referências a esse capítulo serão feitas no texto.

2. Importância do momento angular

Em mecânica clássica, a importância do momento angular é clara: o momento angular de um sistema físico isolado é **constante**. Em alguns casos, mesmo em que o sistema físico não seja isolado, o momento angular pode se conservar. Um exemplo é o de uma partícula de massa **m** confinada a um potencial central, onde a força que atua sobre **m** é sempre voltada à origem $\boldsymbol{O}$ do centro de coordenadas. Existem duas implicações fundamentais desse fato para esse sistema: o movimento da partícula é confinado a um único plano (que passa pela origem e é perpendicular ao momento angular) e ele respeita a segunda lei de Kepler (a velocidade para percorrer uma determinada área é sempre constante).

Em mecânica quântica, iremos promover a quantidade clássica momento angular $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ ao conjunto de observáveis $\mathbb{L}$ ($\mathbb{L}_x$, $\mathbb{L}_y$ e $\mathbb{L}_z$) e iremos verificar que esses operadores comutam com o hamiltoniano $\mathbb{H}$ de um sistema que esteja sujeito a um potencial central $\mathbb{V}(\mathbb{r})$ (nessa notação, $\mathbb{r}$ simboliza o operador produzido pela quantização da quantidade r da mecânica clássica, a coordenada radial de coordenadas esféricas, e não o vetor posição como em outros textos).

Ao longo do texto, iremos diferenciar dois tipos distintos de momento angular: o momento angular que possui um análogo clássico será tratado pelo observável $\mathbb{L}$, e receberá o nome de **momento angular orbital**; o **momento angular de spin** não possui análogo clássico e será representado pelo observável $\mathbb{S}$. Existe uma porção da teoria de momentos angulares que é válida tanto para $\mathbb{L}$ e $\mathbb{S}$; nesses casos, iremos tratar de um momento angular arbitrário $\mathbb{J}$. Além disso, $\mathbb{J}$ também será a notação utilizada para tratar de momento angular total. A distinção entre o momento angular total e um arbitrário será feita de forma devida no texto, para que não haja confusão.

3. Relações de comutação características

a) Momento Angular Orbital, $\mathbb{L}$

Vamos promover as quantidades clássicas de momento angular, $\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y$ e $\mathcal{L}_z$, nos observáveis quânticos de momento angular. Tomemos, por exemplo, a componente na direção x:

$$\mathcal{L}_x = yp_z - zp_y$$

Promovendo $\mathcal{L}_x \rightsquigarrow \mathbb{L}_x$, e usando as quantizações com que já estamos familiares,

$$\mathbb{L}_x = \mathbb{y}\mathbb{p}_z - \mathbb{z}\mathbb{p}_y$$

Podemos fazer essa promoção sem preocupações com os produtos de operadores em decorrência da comutabilidade entre $\mathbb{y}$ e $\mathbb{p}_z$, e $\mathbb{z}$ e $\mathbb{p}_y$. Por essa razão, $\mathbb{L}_x$ é hermitiano, assim como $\mathbb{L}_y$ e $\mathbb{L}_z$, que são obtidos exatamente da mesma forma. Assim, podemos escrever, com um certo abuso de notação,

$$\mathbb{L} = \vec{\mathbb{r}} \times \vec{\mathbb{p}}$$

Onde os vetores $\mathbb{L}$, $\vec{\mathbb{r}}$ e $\vec{\mathbb{p}}$ representam o conjunto de operadores em cada uma das direções.

As relações entre os comutadores são derivadas da comutação entre eles. Vamos calcular, por exemplo, a comutação entre $\mathbb{L}_x$ e $\mathbb{L}_y$:

$$\begin{aligned}
[\mathbb{L}_x, \mathbb{L}_y] &= [\mathbb{y}\mathbb{p}_z - \mathbb{z}\mathbb{p}_y, \mathbb{z}\mathbb{p}_x - \mathbb{x}\mathbb{p}_z] \\
&= [\mathbb{y}\mathbb{p}_z, \mathbb{z}\mathbb{p}_x] - \underbrace{[\mathbb{y}\mathbb{p}_z, \mathbb{x}\mathbb{p}_z]}_{=0} - \underbrace{[\mathbb{z}\mathbb{p}_y, \mathbb{z}\mathbb{p}_x]}_{=0} + [\mathbb{z}\mathbb{p}_y, \mathbb{x}\mathbb{p}_z] \\
&= [\mathbb{y}\mathbb{p}_z, \mathbb{z}\mathbb{p}_x] + [\mathbb{z}\mathbb{p}_y, \mathbb{x}\mathbb{p}_z] \\
&= \mathbb{y}[\mathbb{p}_z, \mathbb{z}]\mathbb{p}_x + \mathbb{x}[\mathbb{z}, \mathbb{p}_z]\mathbb{p}_y \\
&= -i\hbar\mathbb{y}\mathbb{p}_x + i\hbar\mathbb{x}\mathbb{p}_y \\
&= i\hbar\mathbb{L}_z
\end{aligned}$$

Analogamente para os outros componentes, obtém-se uma relação geral:

$$[\mathbb{L}_i, \mathbb{L}_j] = i\hbar\mathbb{L}_k\epsilon_{ijk}$$

Onde ϵ_{ijk} representa o **símbolo de Levi-Civita**.

b) Generalização: momento angular arbitrário $\mathbb{J}$

Quaisquer três observáveis $\mathbb{J}_x$, $\mathbb{J}_y$ e $\mathbb{J}_z$ que satisfazem a relação geral

$$[\mathbb{J}_i, \mathbb{J}_j] = i\hbar\mathbb{J}_k\epsilon_{ijk}$$

São definidos como **momentos angulares**. Introduzamos o operador **quadrado do momento angular** como:

$$\mathbb{J}^2 = \mathbb{J}_x^2 + \mathbb{J}_y^2 + \mathbb{J}_z^2$$

Esse operador é hermitiano, já que vimos que suas componentes são uma a uma hermitianas. Iremos assumir que ele é um observável. Uma relação importante de comutação se dá com o quadrado do momento angular e suas componentes. Vejamos, por exemplo, quanto vale $[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_x]$:

$$[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_x] = [\mathbb{J}_x^2 + \mathbb{J}_y^2 + \mathbb{J}_z^2, \mathbb{J}_x] = [\mathbb{J}_y^2, \mathbb{J}_x] + [\mathbb{J}_z^2, \mathbb{J}_x]$$

Explicitando o quadrado de cada um dos comutadores do lado direito:

$$[\mathbb{J}_y^2, \mathbb{J}_x] = \mathbb{J}_y[\mathbb{J}_y, \mathbb{J}_x] + [\mathbb{J}_y, \mathbb{J}_x]\mathbb{J}_y = -i\hbar\mathbb{J}_y\mathbb{J}_z - i\hbar\mathbb{J}_z\mathbb{J}_y$$

$$[\mathbb{J}_z^2, \mathbb{J}_x] = \mathbb{J}_z[\mathbb{J}_z, \mathbb{J}_x] + [\mathbb{J}_z, \mathbb{J}_x]\mathbb{J}_z = i\hbar\mathbb{J}_z\mathbb{J}_y + i\hbar\mathbb{J}_y\mathbb{J}_z$$

Logo, a soma desses dois comutadores é zero, implicando que

$$\boxed{[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_x] = 0}$$

De fato, pode-se provar de forma análoga que essa relação é válida para qualquer direção, de forma que (abusando a notação):

$$[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}] = 0$$

Antes do fim dessa sessão, ouso ressaltar novamente: essa propriedade de comutabilidade é válida para **todos** os momentos angulares, uma vez que é válida para o momento angular arbitrário. Isso inclui o momento angular orbital $\mathbb{L}$, o momento angular de spin $\mathbb{S}$ e o momento angular total de um sistema.

c) Enunciação do problema

Dadas as definições acima, juntamente com as propriedades delas recorrentes, faz-se necessário que se inicie, de fato, o estudo sobre o momento angular de um sistema quântico. Para isso, teríamos de trabalhar com todas as componentes do momento angular ao mesmo tempo. No entanto, o trabalho com $\mathbb{J}^2$ torna toda a sistemática do problema muito mais simples. Assim, basta que escolhamos uma única direção de trabalho, por exemplo, a direção z, e o momento angular a ela associado, $\mathbb{J}_z$. Mesclaremos os operadores $\mathbb{J}_x$ e $\mathbb{J}_y$ em outros operadores, mais convenientes, que influenciarão $\mathbb{J}_z$, porém não $\mathbb{J}^2$, graças à forma com que ele foi construído.

Dito isso, é importante que se compreenda: poderíamos ter escolhido trabalhar em outra direção que não z, bastando que, para isso, redefiníssemos os operadores de trabalho.

4. Teoria Geral do Momento Angular

Aqui, iremos determinar o espectro de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$. Usaremos autoestados comuns a ambos os operadores nos problemas. A lógica será análoga à de osciladores harmônicos.

a) Definições e Notações

Inicialmente, iremos definir os operadores $\mathbb{J}_+$ e $\mathbb{J}_-$ a partir dos operadores $\mathbb{J}_x$ e $\mathbb{J}_y$:

$$\boxed{\mathbb{J}_\pm = \mathbb{J}_x \pm i\mathbb{J}_y}$$

De forma análoga aos operadores a e $a^\dagger$, os operadores $\mathbb{J}_\pm$ não são hermitianos, são adjuntos um do outro. A partir de agora, iremos trabalhar apenas com os operadores $\mathbb{J}_\pm$, $\mathbb{J}_z$ e $\mathbb{J}^2$, de forma que é importante que conheçamos as relações de comutação entre eles. Fica a cargo do leitor, a partir da definição acima, demonstrar que:

$$[\mathbb{J}_z, \mathbb{J}_\pm] = \pm\hbar\mathbb{J}_\pm$$

$$[\mathbb{J}_+, \mathbb{J}_-] = 2\hbar\mathbb{J}_z$$

$$[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_\pm] = [\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_z] = 0$$

Além disso, é de grande utilidade escrever o produto entre esses operadores:

$$\begin{aligned}\mathbb{J}_\pm\mathbb{J}_\mp &= (\mathbb{J}_x \pm i\mathbb{J}_y)(\mathbb{J}_x \mp i\mathbb{J}_y)\\ &= \mathbb{J}_x^2 + \mathbb{J}_y^2 \mp i[\mathbb{J}_x, \mathbb{J}_y]\\ &= \mathbb{J}_x^2 + \mathbb{J}_y^2 \pm \hbar\mathbb{J}_z\end{aligned}$$

De tal forma que, podemos acrescentar e subtrair $\mathbb{J}_z^2$ para obter:

$$\boxed{\mathbb{J}_\pm\mathbb{J}_\mp = \mathbb{J}^2 - \mathbb{J}_z^2 \pm \hbar\mathbb{J}_z}$$

Essas duas expressões (compactadas acima em uma única equação) podem ser somadas, resultando em:

$$\boxed{\mathbb{J}^2 = \frac{1}{2}(\mathbb{J}_+\mathbb{J}_- + \mathbb{J}_-\mathbb{J}_+) + \mathbb{J}_z^2}$$

Os autovalores e autovetores serão definidos apenas para os operadores $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$: como $\mathbb{J}^2$ é definido como a soma ao quadrado de três operadores, é de se esperar que seus autovalores sejam **positivos** ou **iguais a zero**, e tem unidades do **quadrado de momento angular**. Sabemos que $\hbar$ tem unidades de momento angular, de forma que $\lambda\hbar^2$ tem unidades de momento angular ao quadrado e podemos dizer que são autovalores de $\mathbb{J}^2$, contanto que $\lambda \geq 0$. A notação usual de λ é a seguinte:

$$\lambda = j(j+1)$$

Claramente, se $j \geq 0$, então $\lambda \geq 0$. Não alteramos em nada o autovalor λ, apenas escrevemos ele de uma forma mais conveniente. Dessa forma, já sabemos que o espectro de autovalores de $\mathbb{J}^2$ é $j(j+1)\hbar^2$. Como o espectro de $\mathbb{J}_z$ deve ter unidades de momento angular, vamos usar a notação clássica e dizer que ele vale $m\hbar$, onde m é um número adimensional.

Notemos: até aqui, não obtivemos **nenhuma** propriedade sobre j e m, de forma que não sabemos ainda se são números discretos, contínuos ou mesmo se são relacionados entre si. Estamos apenas dando nomes ao espectro dos operadores para futuramente obtermos, algebricamente, as relações entre esses espectros.

Para autovetores de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ (queremos autoestados que sejam autoestados de **ambos** os operadores ao mesmo tempo, por facilidade algébrica), vamos usar o rótulo "k,j,m" dentro do ket: o índice j remete ao autovalor do operador $\mathbb{J}^2$, o índice m remete ao autovalor do operador $\mathbb{J}_z$ e o índice k serve para separar autoestados que possuam mesmos valores de j e m, mas que representam estados diferentes (como degenerescências). Ou seja,

$$\boxed{\mathbb{J}^2|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|k,j,m\rangle}$$
$$\boxed{\mathbb{J}_z|k,j,m\rangle = m\hbar|k,j,m\rangle}$$

Essas equações, provavelmente, são as mais importantes que iremos tratar de agora em diante.

b) Autovalores de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$

Vamos buscar por propriedades dos autovalores desses operadores.

Propriedade: Se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são autovalores de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ associados ao mesmo autovetor $|k,j,m\rangle$, então j e m satisfazem a desigualdade:

$$-j \leq m \leq j$$

Demonstração:

Considere a atuação dos operadores $\mathbb{J}_+$ e $\mathbb{J}_-$ no autovetor $|k,l,m\rangle$: $\mathbb{J}_+|k,j,m\rangle$ e $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle$. Certamente, a norma ao quadrado desses novos vetores deve ser positiva ou igual a zero:

$$|\mathbb{J}_+|k,j,m\rangle|^2 = \langle k,j,m|\mathbb{J}_-\mathbb{J}_+|k,j,m\rangle \geq 0$$

$$|\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle|^2 = \langle k,j,m|\mathbb{J}_+\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle \geq 0$$

Vamos calcular o lado direito utilizando as fórmulas dos produtos $\mathbb{J}_\pm\mathbb{J}_\mp$:

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|\mathbb{J}_-\mathbb{J}_+|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|\mathbb{J}^2 - \mathbb{J}_z^2 - \hbar\mathbb{J}_z|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|\mathbb{J}_+\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|\mathbb{J}^2 - \mathbb{J}_z^2 + \hbar\mathbb{J}_z|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2\end{aligned}$$

Essas expressões nas desigualdades originam:

$$j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \geq 0$$

$$j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \geq 0$$

Tomando a evidência de $\hbar^2$, juntamente com o agrupamento conveniente, ficamos com:

$$j(j+1) - m(m+1) \geq 0$$

$$j(j+1) - m(m-1) \geq 0$$

A próxima passagem é um pouco "capciosa": vamos reescrever as duas desigualdades como um produto de dois termos. Vamos começar abrindo a desigualdade superior e trabalhando com ela:

$$j(j+1) - m(m+1) = j^2 + j - m^2 - m = j^2 + j - m^2 - m \underbrace{+jm - jm}_{\substack{soma\ e \\ subtrai\ jm}}$$

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

De forma análoga para a segunda desigualdade,

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

Assim, as desigualdades ficam:

$$(j-m)(j+m+1) \geq 0$$
$$(j+m)(j-m+1) \geq 0$$

Precisamos, então, que o produto de duas quantidades seja positivo ou igual a zero. Isto é, ou ambas as quantidades são positivas ou ambas são negativas. Tomemos a desigualdade superior: caso ambas sejam positivas:

$$j \geq m \rightarrow m \leq j$$
$$j+1 \geq -m \rightarrow -(j+1) \leq m$$

Isto é,

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

Caso ambas sejam negativas, o resultado é análogo, porém redundante, pois $j \geq 0$. Dessa forma, vejamos a desigualdade inferior caso ambas sejam positivas:

$$-j \leq m \leq j+1$$

Assim, para que ambas essas condições sejam satisfeitas simultaneamente,

$$-j \leq m \leq j$$

Como gostaria de se demonstrar.

Propriedade: Seja $|k,j,m\rangle$ um autovetor de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Se $m=-j$, então $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle = 0$. Se $m > -j$, então $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle$ é um autovetor não nulo de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $\hbar(m-1)$.

Compreendendo a propriedade: O operador $\mathbb{J}_-$ abaixa em uma unidade de $\hbar$ o autoestado do operador $\mathbb{J}_z$. Se o autoestado já for o menor possível, isto é, $m=-j$, então o operador $\mathbb{J}_-$ retorna zero.

Demonstração:

Inicialmente, vamos demonstrar a atuação de $\mathbb{J}_-$ num estado onde $m=-j$. A norma ao quadrado de $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle$ é:

$$|\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle|^2 = \hbar^2[j(j+1) - m(m-1)]$$

Como vimos anteriormente. Se $m=-j$, então a norma é nula. Dessa forma, concluímos que $\mathbb{J}_-|k,j,-j\rangle = 0$. Vamos provar o contrário, ou seja, que $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle = 0$ implica que $m=-j$(só existe um estado em que isso é verdade, o estado mínimo). Para isso, vamos atuar $\mathbb{J}_+$ sobre $\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle$, partindo da hipótese que ele é zero:

$$\mathbb{J}_+\mathbb{J}_-|k,j,m\rangle = 0$$

Usando a expressão que já conhecemos para o produto $\mathbb{J}_+\mathbb{J}_-$, já usando as equações de autovalores-autovetores, temos:

$$\hbar^2[j(j+1) - m(m-1)]|k, l, m\rangle = 0$$

E isso só é verdade se $m = -j$, como era esperado.

Vamos agora demonstrar que se $m > -j$, então $\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$ é um autovetor de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-1)\hbar^2$. Se $m > -j$, então $\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$ é um vetor não nulo, já que sua norma vale $\hbar^2[j(j+1) - m(m-1)]$. Como os operadores $\mathbb{J}_-$ e $\mathbb{J}^2$ comutam, podemos aplicar $\mathbb{J}^2$ em $\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$ e fazer o seguinte:

$$\mathbb{J}^2\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle = \mathbb{J}_-\mathbb{J}^2|k, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$$

Isso mostra que $\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$ é um autovetor de $\mathbb{J}^2$ com autovalor $\hbar^2 j(j+1)$, como era esperado. Infelizmente, $\mathbb{J}_-$ e $\mathbb{J}_z$ não comutam, de forma que a mesma artimanha não pode ser utilizada: precisamos do comutador entre esses operadores. Como já foi visto,

$$[\mathbb{J}_z, \mathbb{J}_-] = -\hbar\mathbb{J}_- = \mathbb{J}_z\mathbb{J}_- - \mathbb{J}_-\mathbb{J}_z$$

$$\therefore \mathbb{J}_z\mathbb{J}_- = -\hbar\mathbb{J}_- + \mathbb{J}_-\mathbb{J}_z$$

Assim, atuando $\mathbb{J}_z$ sobre $\mathbb{J}_-|k, l, m\rangle$, temos:

$$\begin{aligned}\mathbb{J}_z\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle &= (-\hbar\mathbb{J}_- + \mathbb{J}_-\mathbb{J}_z)|k, j, m\rangle \\ &= -\hbar\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle + m\hbar\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle \\ &= \hbar(m-1)\mathbb{J}_-|k, jl, m\rangle\end{aligned}$$

Portanto, $\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle$ é um autovetor de $\mathbb{J}_z$ com autovalor $\hbar(m-1)$, como gostaria de se demonstrar.

Baseado no que foi feito acima, fica a cargo do leitor a demonstração da propriedade abaixo:

Propriedade: Seja $|k, j, m\rangle$ um autovetor de $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$ com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Se $m = j$, então $\mathbb{J}_+|k, j, m\rangle = 0$. Se $m < j$, então $\mathbb{J}_+|k, j, m\rangle$ é um autovetor não nulo de $\mathbb{J}^2$e $\mathbb{J}_z$ com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m+1)\hbar$.

Compreendendo a propriedade: O operador $\mathbb{J}_+$ aumenta em uma unidade de $\hbar$ o autoestado do operador $\mathbb{J}_z$. Se o autoestado já for o maior possível, isto é, $m = j$, então o operador $\mathbb{J}_+$ retorna zero.

O raciocínio a seguir é um pouco complexo (uma infelicidade da forma de abordagem do Cohen), existindo formas mais simples de demonstrar os resultados a serem mostrados. Sugiro que, em caso de dúvida, verifiquem o livro do Griffths.

Como ainda não conhecemos a natureza dos números m e j, podemos supor que certamente existe um inteiro p de tal forma que

$$-j \leq m - p < -j + 1$$

Isto é, entre dois termos $-j$ e $-j+1$, existe um $m - p$. Isso resulta da propriedade $-j \leq m \leq j$. Se isso é verdade, então podemos considerar um conjunto de vetores originados pela sucessiva aplicação de $\mathbb{J}_-$ no ket $|k, j, m\rangle$ p vezes:

$$|k, j, m\rangle, \mathbb{J}_-|k, j, m\rangle, \dots, (\mathbb{J}_-)^p|k, j, m\rangle$$

Essa sequência de vetores de $p+1$ termos possui autovalores de acordo com a n-ésima aplicação de $\mathbb{J}_-$: $(\mathbb{J}_-)^n|k, j, m\rangle$ tem autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-n)\hbar$, para $n = 0,1, \dots, p$. Vamos agora atuar $\mathbb{J}_-$ sobre $(\mathbb{J}_-)^p|k, j, m\rangle$. Isso pode resultar em duas coisas: ou em zero, caso esse vetor já seja o patamar inferior dos estados $(m = -j)$, ou em um outro autovetor. Vamos supor o caso mais interessante, em que possamos sim abaixar o estado, de forma que $\mathbb{J}_-(\mathbb{J}_-)^p|k, j, m\rangle$ se torna um autovetor com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ para $\mathbb{J}^2$ e $(m-p-1)\hbar$ para $\mathbb{J}_z$.

Ou seja, em nossa suposição, $m - p > -j$. Mas isso está contradição com o que foi visto anteriormente, onde $m - p - 1 < -j$. Dessa forma, a suposição de que podemos abaixar o estado é falsa, de forma que $(\mathbb{J}_-)^p|k, j, m\rangle$ é tal que m é mínimo, de forma que $\mathbb{J}_-(\mathbb{J}_-)^p|k, j, m\rangle = 0$, necessariamente. Portanto,

$$m - p = -j$$

De forma análoga, podemos encontrar um inteiro q que satisfaça

$$m + p = j$$

Utilizando a sequência de aplicações sucessivas de $\mathbb{J}_+$ q vezes sobre $|k, j\ m\rangle$. Subtraindo a expressão superior da inferior, ficamos com:

$$2j = p + q$$

Como p e q são inteiros, por hipótese, j **deve** ser um valor **inteiro** ou **semi-inteiro**. Isto é, um número inteiro ou um número ímpar dividido por 2. Ou seja,

$$\boxed{j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots}$$

E, graças às consecutivas operações de $\mathbb{J}_+$ sobre $|k, j, -j\rangle$ até que se atinja o estado $|k, j, j\rangle$, temos saltos **discretos** de uma unidade sobre m, de forma que m é **inteiro** se j é **inteiro** ou **semi-inteiro** se j é **semi-inteiro**.

Essas informações, por mais que não seja de tão fundamental importância que sejam deduzidas, é muito importante que sejam **entendidas** e **memorizadas**:

Se $\mathbb{J}$ é um momento angular genérico, que obedece as relações de comutações impostas, de autovetores $|k, j, m\rangle$, onde j denota a referência ao autovalor de $\mathbb{J}^2$, m denota a referência ao autovaor de $\mathbb{J}_z$, k denota um índice que pode distinguir entre dois autoestados que possuam mesmos valores de j e m, porém que sejam estados distintos (degenerescência) e de autovalores $j(j+1)\hbar^2$ para $\mathbb{J}^2$ e $m\hbar$ para $\mathbb{J}_z$, então os valores possíveis para j são **inteiros positivos**, **semi-inteiros positivos** ou **zero**:

$$\boxed{j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots}$$

E, para um valor fixo de j, existem $2j + 1$ valores possíveis para m:

$$-j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

c) A base $\{|\boldsymbol{k}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle\}$

Em resumo, irei sumarizar as informações que conhecemos sobre a base dos autovalores que são comuns a $\mathbb{J}^2$ e $\mathbb{J}_z$, denotada por $\{|k, j, m\rangle\}$.

$$\begin{aligned}
&\mathbb{J}^2|k, j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2|k, j, m\rangle \\
&\mathbb{J}_z|k, j, m\rangle = m\hbar|k, j, m\rangle \\
&\mathbb{J}_+|k, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)}|k, j, m + 1\rangle \\
&\mathbb{J}_-|k, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)}|k, j, m - 1\rangle
\end{aligned}$$

(O valor dessas constantes multiplicativas dos estados ao aplicar $\mathbb{J}_\pm$ são obtidas como na demonstração da primeira propriedade).

Vale ressaltar uma característica importante: existem matrizes bastante características em mecânica quântica. Algumas que vimos em aula são as matrizes de rotação. Note como as matrizes $\mathbb{J}_z$ e $\mathbb{J}^2$ se parecem com matrizes de rotação quando são representadas na base de seus autovetores. Vamos supor $j = 1/2$; nesse caso $m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Assim, os autoestados são $\left|k, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$ e $\left|k, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$. Atuando $\mathbb{J}^2$ nesses estados, obtemos:

$$\mathbb{J}^2\left|k, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2\left|k, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|k, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\mathbb{J}^2\left|k, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|k, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

De forma que sua representação matricial é:

$$\mathbb{J}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

Que é muito parecida com matrizes de rotação vistas em sala em exemplos de outras partes da matéria.

5. Aplicação: Momento Angular Orbital $\mathbb{L}$

As propriedades vistas até aqui são válidas para **todos** os momentos angulares, decorrentes unicamente das relações de comutação que foram necessárias para definir o que é um momento angular. Vamos agora aplicar esse conhecimento para tratar do momento angular orbital $\mathbb{L}$ de uma partícula sem spin (ainda iremos definir essa quantidade mais adiante). Vamos ver que os autovalores do operador $\mathbb{L}^2$ são da forma $\hbar^2 l(l + 1)$, para l inteiro positivo ou zero (os valores semi-inteiros de j como vimos anteriormente não são válidos nesse caso, e veremos o motivo).

a) Autovalores e autofunções de $\mathbb{L}^2$ e $\mathbb{L}_z$

Sabemos que a representação na base das posições, $\{\,|\boldsymbol{r}\rangle\,\}$, os observáveis $\vec{\mathbb{r}}$ e $\vec{\mathbb{p}}$ tem efeitos específicos:

$$\vec{\mathbb{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle$$
$$\vec{\mathbb{p}}|\boldsymbol{r}\rangle = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}|\boldsymbol{r}\rangle$$

De tal forma que podemos escrever a atuação das componentes do momento angular orbital $\mathbb{L}$ como:

$$\mathbb{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$\mathbb{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$\mathbb{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

É mais conveniente que trabalhemos em coordenadas esféricas, pois (como veremos), vários operadores de momento angular atuam unicamente nos ângulos θ e ϕ, e não na variável radial r. Nessas coordenadas, os operadores $\mathbb{L}_x$, $\mathbb{L}_y$ e $\mathbb{L}_z$ se escrevem, na base das posições,

$$\mathbb{L}_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$\mathbb{L}_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$\mathbb{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Que originam os operadores convenientes para trabalho, $\mathbb{L}^2$, $\mathbb{L}_+$ e $\mathbb{L}_-$:

$$\mathbb{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$
$$\mathbb{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

Note que agora mudamos o jeito de representar a base das posições: em coordenadas retangulares, podemos relacionar $|\boldsymbol{r}\rangle = |x,y,z\rangle$; agora, em coordenadas esféricas, $|\boldsymbol{r}\rangle = |r,\theta,\phi\rangle$. Projetando $|\varphi\rangle$ nessa base, obtemos a **função de onda em coordenadas esféricas**,

$$\langle r,\theta,\phi|\varphi\rangle = \varphi(r,\theta,\phi)$$

Sabemos que a atuação de $\mathbb{L}^2$ em seus autoestados origina, em analogia a $\mathbb{J}^2$:

$$\mathbb{L}^2|\varphi\rangle = \hbar^2 l(l+1)|\varphi\rangle$$

Projetando sobre a base das posições, em coordenadas esféricas, ficamos com:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\varphi(r,\theta,\phi)=l(l+1)\varphi(r,\theta,\phi)$$

Podemos fazer o mesmo com a atuação de $\mathbb{L}_z$, que origina, em analogia a $\mathbb{J}_z$,

$$\mathbb{L}_z|\varphi\rangle=m\hbar|\varphi\rangle$$

Na base das posições,

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}\varphi(r,\theta,\phi)=m\varphi(r,\theta,\phi)$$

Como vimos anteriormente, associando $j\leftrightarrow l$ e $m\leftrightarrow m$(a rigorosidade implicaria em escrever m_l, mas omitirei esse índice para não carregar a notação), l poderia, em princípio, assumir qualquer valor inteiro ou semi-inteiro positivo e, para l fixo, m poderia assumir os valores $-l,-l+1,\dots,l-1,l$ $(2l+1$ valores).

Como nas equações acima não existe dependência na coordenada radial r, podemos denotar que as derivações atuam apenas em **uma porção angular** de $\varphi(r,\theta,\phi)$. Denotaremos, então, as autofunções comuns a $\mathbb{L}^2$ e $\mathbb{L}_z$ como $Y_l^m(\theta,\phi)$ com autovalores, respetivamente, $l(l+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Isto é,

$$\langle r,\theta,\phi|\varphi\rangle=R(r)\langle\theta,\phi|Y\rangle=R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

Ou seja, se compararmos com a teoria vista anteriormente, o ket $|Y\rangle$ seria análogo ao ket $|k,j,m\rangle$, no caso do momento angular generalizado. Isso implicaria que a função $Y_l^m(\theta,\phi)$ precisaria de mais um índice k, que indicaria a distinção entre autofunções distintas com os mesmos autovalores. No entanto, Y_l^m são unicamente determinadas por esses dois índices (não existem duas ou mais autofunções que possuam o mesmo autovalor, a menos de constantes), de tal forma que não adotaremos o índice k de agora em diante.

Assim explicado, podemos então agora definir de forma mais simples e intuitiva a atuação de $\mathbb{L}^2$ e $\mathbb{L}_z$ sobre os autoestados angulares $|l,m\rangle$:

$$\mathbb{L}^2|l,m\rangle=l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle$$
$$\mathbb{L}_z|l,m\rangle=m\hbar|l,m\rangle$$

Projetando sobre a base das posições angulares,

$$\langle\theta,\phi|l,m\ \rangle=Y_l^m(\theta,\phi)$$

Comentário: para a normalização de $\varphi(r,\theta,\phi)$, é conveniente que normalizemos separadamente $R(r)$ e $Y_l^m(\theta,\phi)$, de forma que:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta\,|Y_l^m(\theta,\phi)|^2d\theta d\phi=1$$

$$\int_0^{\infty}|R(r)|r^2dr=1$$

Até o momento, determinamos as autofunções comuns aos operadores $\mathbb{L}^2$ e $\mathbb{L}_z$: as funções $Y_l^m(\theta,\phi)$. No entanto, ainda não especificamos nada sobre l e m que definem os autovalores desses operadores, além do que já sabíamos de j e m, decorrente das relações de comutação que definem um momento angular. Vamos estudar com mais cuidado agora esses autovalores. Note o seguinte,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi)$$

A atuação da derivação parcial sobre $Y_l^m(\theta,\phi)$ mantendo constante a porção dependente de θ e multiplicando Y_l^m por uma constante implica que:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \Theta_l^m(\theta)e^{im\phi}$$

Onde $\Theta_l^m(\theta)$ é uma função que só depende do ângulo azimutal θ. Como $e^{im\phi}$ está relacionada à rotação **do espaço** (pois ϕ define um ângulo espacial), acrescer ϕ em 2π deve manter $e^{im\phi}$ igual. Supondo $\phi = 0$, temos:

$$Y_l^m(\theta,0) = Y_l^m(\theta,2\pi)$$

Que leva a:

$$e^{im2\pi} = 1$$

Necessariamente, portanto, m **tem de ser um número inteiro**. Dessa forma, l **também deve ser inteiro**, descartando os valores semi-inteiros que seriam o resultado mais geral possível do momento angular. Note a importância do que foi feito aqui: como o momento angular orbital $\mathbb{L}$ está relacionado com **rotações espaciais** de um objeto quântico, a periodicidade espacial **implica** em m e l inteiros. Veremos, em outro momento, que tal argumento não existe no momento angular de spin, de forma que ele pode, de fato, assumir valores semi-inteiros.

As funções $Y_l^m(\theta,\phi)$ recebem o nome de **harmônicos esféricos**. Como podemos determina-los? Sabemos que existe um valor mínimo para m, bem como um valor máximo: $-l$ e $+l$, respectivamente, para um dado l. Dessa forma, podemos escolher iniciar do patamar mais baixo de m, $-l$, e tentar abaixar esse nível com $\mathbb{L}_-$, obtendo 0 como resultado:

$$\mathbb{L}_-|l,-l\rangle = 0$$

E projetar esse resultado sobre a base das posições, dada a expressão de $\mathbb{L}_-$ nas posições,

$$\hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_l^{-l}(\theta,\phi) = 0$$

A resolução dessa equação origina, portanto, Y_l^{-l}. Iterar o operador $\mathbb{L}_+$ sobre a expressão resultante $2l$ vezes origina **todas** as Y_l^m possíveis. Essa é uma forma de determinar os harmônicos esféricos. Outra forma completamente análoga seria tentar aplicar o levantamento $\mathbb{L}_+$ no estado limite superior, $|l,l\rangle$, que também resultaria em zero:

$$\mathbb{L}_+|l,l\rangle = 0$$

Projetando sobre a base das posições,

$$\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_l^l(\theta,\phi) = 0$$

Cuja resolução resultaria em Y_l^l. Iterar $\mathbb{L}_-$ nesse resultado $2l$ vezes também originaria **todas** as Y_l^m possíveis. No próximo item, mostramos algumas expressões possíveis para os harmônicos esféricos.

Aqui, não exibiremos a expressão de $R(r)$ (tal assunto será visto ao abordar o átomo de hidrogênio). No entanto, vejamos que R não pode depender do número quântico m.

Se $\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi) = R_{l,m}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$, então, na base das posições (denotarei por L^2, L_z e $L_\pm$ os operadores $\mathbb{L}^2$, $\mathbb{L}_z$ e $\mathbb{L}_\pm$ projetados nessa base):

$$\begin{aligned}
&L^2\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi)\\
&L_z\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi) = m\hbar\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi)\\
&L_\pm\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi) = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\varphi_{l,m\pm1}(r,\theta,\phi)
\end{aligned}$$

Mas, note com cuidado o que é escrito na terceira expressão:

$$\begin{aligned}
L_\pm\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi) &= R_{l,m}(r)L_\pm Y_l^m(\theta,\phi)\\
&= \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}R_{l,m}(r)Y_l^{m\pm1}(\theta,\phi)
\end{aligned}$$

Assim,

$$R_{l,m\pm1}(r) = R_{l,m}(r)$$

(pois os operadores levantamento e abaixamento atuam apenas sobre os esféricos harmônicos). Assim, $R = R_l$.

Porque a porção radial de $\varphi(r,\theta,\phi)$ depende de l? Uma função da forma $f(r)g(\theta,\phi)$ pode ser contínua na origem ($r = 0$ e Ω arbitrário) somente se $g(\theta,\phi)$ se reduzir a uma constante na origem ou se $f(r)$ ir a zero em $r = 0$. Consequentemente, se queremos que $\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi)$ seja continuam somente a função radial correspondente a $l = 0$ pode ser não nula em $r = 0$, pois Y_0^0 é, de fato, uma constante. De forma similar, se gostaríamos que $\varphi_{l,m}(r,\theta,\phi)$ fosse diferenciável na origem, obteremos condições para $R_l(r)$ que dependem de l.

b) Os Harmônicos Esféricos $Y_l^m(\theta,\phi)$

Iremos exemplificar o início do cálculo da expressão geral de Y_l^m começando por calcular Y_l^l e iterar $\mathbb{L}_-$ na base das posições (L_-):

$$L_+Y_l^l(\theta,\phi) = 0$$

A solução dessa equação, lembrando que $Y_l^l(\theta,\phi) = \Theta_l^l(\theta)e^{il\phi}$, é:

$$Y_l^l(\theta,\phi) = c_l(\sin\theta)^l e^{il\phi}$$

A determinação de c_l é um pouco complicada. Ele é feito impondo a normalização de Y_l^l. Ao leitor interessado, o mesmo encontra-se na página 679 da referência. Resumo-me a expor seu resultado:

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

Usando esse fator de normalização, juntamente com a ação de L_-, obtém-se uma expressão geral para Y_l^m:

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

De fato, essa expressão pode ser simplificada com o uso dos **polinômios de Legendre** e as **funções associadas de Legendre**. Para $m = 0$, a porção $\Theta(\theta)$ pode ser escrita como uma combinação linear de polinômios de Legendre:

$$\Theta(\theta) = \sum_l c_l P_l(\cos\theta)$$

Com

$$c_l = \frac{2l+1}{2}\int_0^\pi \sin\theta\, P_l(\cos\theta)\Theta(\theta)d\theta$$

Para um m positivo, iteramos L_+ l vezes:

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

Onde P_l^m denota uma **função associada de Legendre**,

$$P_l^m(u) = \sqrt{(1-u^2)^m}\frac{d^m}{du^m}P_l(u)$$

Para m negativo, basta que:

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

Em resumo, basta ao leitor que seja familiar com a expressão de três dos harmônicos:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi} \qquad Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

6. Considerações Finais

Espero que o trabalho aqui exibido tenha ajudado o leitor a compreender melhor o conceito de momento angular em mecânica quântica. Uma abordagem mais completa do que foi tratado aqui pode ser visto no livro de MQ do Cohen, base para esse estudo.