Momento angular

Prof. Luiz T. F. Eleno

Departamento de Engenharia de Materiais
Escola de Engenharia de Lorena
Universidade de São Paulo

2019

Plano de aula

1. Momento Angular
   - Teoria clássica
   - Quantização
2. Relações de comutação
   - Relações de comutação
   - Incompatibilidade dos componentes do momento angular
   - O comutador $[L^2, L_z]$
3. Autovalores do momento angular
   - Operadores escada
   - Propriedades dos operadores escada
   - Restrição sobre os autovalores de $\hat{L}_z$
   - Máximo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Mínimo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Relação entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Autovalores de $\hat{L}_z$
   - Quantização de L_z
4. Autofunções do momento angular
   - Momento angular em coordenadas esféricas
   - Autoestados do momento angular

Plano de aula

Momento angular

Teoria Clássica

- Na teoria clássica de forças centrais, energia e momento angular são grandezas conservadas
- Em Quântica, o momento angular também desempenha um papel importante
- Veremos hoje que os números quânticos l e m estão relacionados ao momento angular
- Classicamente, o momento angular é dado por

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

em que $\mathbf{r} = (x, y, z)$ é o vetor posição, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ é o vetor momento linear e "$\times$" representa o produto vetorial entre dois vetores, dado pelo determinante

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

o que fornece um vetor

$$\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

cujas componentes L_x, L_y e L_z são dadas por

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x$$

Exercício

26. Quais são as unidades de L? Compare-as com as unidades de $\hbar$.

Quantização do momento angular

- Na mecânica quântica, os operadores correspondentes a L_x, L_y e L_z são obtidos pela receita usual de representar os momentos lineares por

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\,, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

- $\Rightarrow$ Os operadores $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$ ficam

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z\\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\end{aligned}$$

- Tentaremos encontrar os autovalores e autoestados correspondentes desses operadores
- Primeiramente, buscaremos pelos autovalores usando uma técnica algébrica parecida com a que usamos no oscilador harmônico
- Por fim, encontraremos os autoestados
  - ***spoiler alert:*** são os harmônicos esféricos!

Plano de aula

Relações de comutação

- Vamos encontrar as relações de comutação entre as diferentes componentes do momento angular:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$$

- Vejamos:

$$[\hat{L}_x, L_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$$

- Aplicando a relação distributiva $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]$$

- Relembrando um dos exercícios da aula sobre Mecânica Quântica 3D, os únicos operadores que não comutam são x com $\hat{p}_x$, y com $\hat{p}_y$ e z com $\hat{p}_z$:

$$[w, \hat{p}_w] = i\hbar \qquad (w = x, y, z)$$

- Com isso, os dois termos do meio cancelam e podemos reescrever o comutador como

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = y\hat{p}_x[\hat{p}_z, z] + x\hat{p}_y[z, \hat{p}_z] = y\hat{p}_x(-i\hbar) + x\hat{p}_y(i\hbar) = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)$$

ou seja,

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

Relações de comutação

- Vimos que

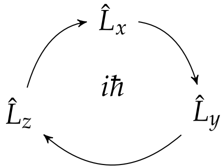
$$\boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z}$$

- Você pode conferir que os outros comutadores entre as componentes do momento angular são:

$$\boxed{[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x}$$

$$\boxed{[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y}$$

- Veja que eles são obtidos por permutação cíclica de x, y e z, de acordo com o diagrama abaixo:



Incompatibilidade dos componentes do momento angular

- Veja que, porque as componentes de **L** não comutam entre si, L_x, L_y e L_z são **observáveis incompatíveis**
- De fato, o princípio da incerteza generalizado diz que

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left\langle [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \right\rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \left\langle i\hbar \hat{L}_z \right\rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \hat{L}_z \right\rangle^2$$

ou seja,

$$\sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \hat{L}_z \right\rangle \right|$$

- Por esse motivo, os operadores L_x e L_y não têm o mesmo conjunto de autoestados — veja o Ex. 68 da Lista 1:

Exercício 68 da Lista 1:

Mostre que, se dois operadores $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ não comutam, isto é, se $[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0$, eles não podem ter o mesmo conjunto completo de autofunções — ou seja, eles não podem ter as mesmas autofunções. **Dica:** demonstre que, se $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ têm as mesmas autofunções, então eles devem necessariamente comutar: $[\hat{P}, \hat{Q}]f = 0$ para qualquer função f no espaço de Hilbert.

- O mesmo vale para $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ e $\hat{L}_z$, $\hat{L}_x$

O comutador $[L^2, L_z]$

- Por outro lado, o que acontece com o comutador $[L^2, L_z]$?
- Veja que

$$L^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

- Portanto,

$$[L^2, L_z] = [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + \cancelto{0}{[L_z^2, L_z]}$$

- Vamos usar o Ex. 66(a) da Lista 1:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

- Com isso:

$$\begin{aligned}[\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_x + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_x)\hat{L}_y\end{aligned}$$

ou seja,

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0}$$

- Segue também que

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0}$$

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0}$$

ou, mais sucintamente,

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{\mathbf{L}}] = 0}$$

Autoestados simultâneos de $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$

- Já que $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$ comutam, ou seja, $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$, os dois operadores compartilham autofunções $\Rightarrow$ **autoestados simultâneos** f para os dois operadores:

$$\hat{L}^2 f = \lambda f \qquad \text{e} \qquad \hat{L}_z f = \mu f$$

- Repare que eles não precisam compartilhar autovalores, apenas autoestados
  - f: autoestado simultâneo de $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$
  - λ: autovalor de $\hat{L}^2$
  - μ: autovalor de $\hat{L}_z$
- Vamos tentar agora encontrar os autovalores λ e μ, para depois encontrar os autoestados f

Plano de aula

1. Momento Angular
   - Teoria clássica
   - Quantização
2. Relações de comutação
   - Relações de comutação
   - Incompatibilidade dos componentes do momento angular
   - O comutador $[L^2, L_z]$
3. Autovalores do momento angular
   - Operadores escada
   - Propriedades dos operadores escada
   - Restrição sobre os autovalores de $\hat{L}_z$
   - Máximo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Mínimo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Relação entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$
   - Autovalores de $\hat{L}_z$
   - Quantização de L_z
4. Autofunções do momento angular
   - Momento angular em coordenadas esféricas
   - Autoestados do momento angular

Operadores escada

- Vamos buscar os autovalores de $\hat{L}_z$ e $\hat{L}^2$ com a ajuda dos **operadores escada** $\hat{L}_+$ e $\hat{L}_-$:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \qquad \text{operador levantamento}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y \qquad \text{operador abaixamento}$$

ou, mais sucintamente,

$$\boxed{\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y}$$

- O comutador com $\hat{L}_z$ é

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] \pm i\left[\hat{L}_z, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_y \pm i(-i\hbar\hat{L}_x)$$

$$= i\hbar\hat{L}_y \pm \hbar\hat{L}_x = \hbar\left(\pm\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) = \pm\hbar\left(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y\right)$$

ou seja,

$$\boxed{\left[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{L}_\pm}$$

- Além disso, é claro que (por quê?)

$$\boxed{\left[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm\right] = 0}$$

Propriedades dos operadores escada

Teorema 1 (Propriedades de $\hat{L}_\pm$).

1. *Se f é uma autofunção de $\hat{L}^2$ com autovalor λ, então $\hat{L}_\pm f$ também é, com o mesmo autovalor.*
2. *Se f é uma autofunção de $\hat{L}_z$ com autovalor μ, então $\hat{L}_\pm f$ também é, com autovalor $\mu \pm \hbar$.*

- Demonstração:
  1. Temos que $\hat{L}^2 f = \lambda f$; da relação $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$, segue que

     $$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] f = \hat{L}^2(\hat{L}_\pm f) - \hat{L}_\pm(\hat{L}^2 f) = 0$$

     ou seja,

     $$\hat{L}^2(\hat{L}_\pm f) - \hat{L}_\pm(\lambda f) = 0$$

     e portanto

     $$\hat{L}^2(\hat{L}_\pm f) = \lambda(\hat{L}_\pm f)$$

     $\square$

  2. Temos que $\hat{L}_z f = \mu f$; da relação $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$, segue que

     $$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] f = \hat{L}_z(\hat{L}_\pm f) - \hat{L}_\pm(\hat{L}_z f) = \pm\hbar\hat{L}_\pm f$$

     ou seja,

     $$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm f) - \hat{L}_\pm(\mu f) = \pm\hbar\hat{L}_\pm f$$

     e portanto

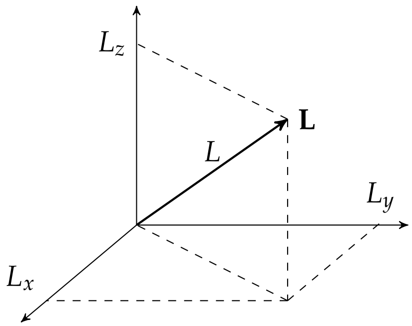
     $$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm f) = (\mu \pm \hbar)(\hat{L}_\pm f)$$

     $\square$

Restrição sobre os autovalores de $\hat{L}_z$

- Assim, o operador $\hat{L}_+$ é o **operador levantamento**, pois **aumenta** o autovalor de $\hat{L}_z$ em $\hbar$
- E o operador $\hat{L}_-$ é o **operador abaixamento**, pois **diminui** o autovalor de $\hat{L}_z$ em $\hbar$

- No entanto, esperamos uma restrição nos autovalores para $\hat{L}_z$: deve haver um máximo (e um mínimo) valor para L_z, relacionado ao valor total do momento angular, $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$, que é $L = |\mathbf{L}| = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2}$
  - por exemplo, $\mathbf{L}$ poderia estar no plano xy, caso em que $L_z = 0$;
  - ou poderia formar um ângulo de 60° com o eixo z, de modo que seria $L_z = |\mathbf{L}|/2$
  - ou $\mathbf{L}$ poderia apontar na direção z (ou $-z$), e portanto $L_z = L$ (ou $L_z = -L$)



- Assim, para um dado valor de L (ou L^2), existem diversas possibilidades para L_z
- Mas lembre que os autovalores de um operador hermitiano formam o conjunto de possíveis resultados de medidas do observável por ele representado
  - devem existir, portanto, vários autovalores de $\hat{L}_z$ para cada autovalor de $\hat{L}^2$

Máximo autovalor de $\hat{L}_z$

- Vamos pensar então no máximo autovalor μ_t de $\hat{L}_z$. Vamos chamar o autoestado correspondente de f_t (t de *top*).
- Precisamos então impor a condição

$$\hat{L}_+ f_t = 0$$

  de forma que não seja possível aumentar ainda mais o autovalor acima do máximo valor μ_t
- Vamos chamar o máximo autovalor de $\mu_t = \hbar l$ (veremos mais adiante o porquê):

$$\hat{L}_z f_t = \hbar l f_t$$

- Ao mesmo tempo, o autovalor de $\hat{L}^2$, relacionado ao momento angular total, é λ, de modo que

$$\hat{L}^2 f_t = \lambda f_t$$

$\rightarrow$

- Vamos fazer agora o seguinte:

$$\hat{L}_\pm \hat{L}_\mp = \left(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y\right) = \hat{L}_x^2 \mp i\hat{L}_x\hat{L}_y \pm i\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_y^2$$
$$= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i\left(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\right) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i\left(i\hbar\hat{L}_z\right)$$
$$= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \pm \hbar\hat{L}_z$$

- Mas, considerando que

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\,,$$

podemos reescrever como

$$\hat{L}_\pm \hat{L}_\mp = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar\hat{L}_z$$

ou ainda

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_\pm \hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z}$$

- Segue disso que

$$\hat{L}^2 f_t = \hat{L}_- \overbrace{\cancel{\hat{L}_+ f_t}}^{0} + \hat{L}_z^2 f_t + \hbar\hat{L}_z f_t$$

ou ainda

$$\lambda f_t = \hat{L}_z(l\hbar f_t) + \hbar l\hbar f_t = l^2\hbar^2 f_t + l\hbar^2 f_t$$

e portanto

$$\boxed{\lambda = \hbar^2 l(l+1)}$$

que fornece o autovalor de $\hat{L}^2$ (λ) em função do máximo autovalor de $\hat{L}_z$ ($\hbar l$)

  - já encontramos a expressão $l(l+1)$ antes, lembra?

Mínimo autovalor de $\hat{L}_z$

- Como vimos, existe também um mínimo autovalor de $\hat{L}_z$ para o mesmo autovalor de $\hat{L}^2$
- $\Rightarrow$ Se o autoestado correspondente é f_b (b de *bottom*), precisamos impor

$$\hat{L}_- f_b = 0$$

  de modo que não é possível abaixar os autovalores além do mínimo
- Vamos chamar o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$ de $\hbar\bar{l}$, o que significa que

$$\hat{L}_z f_b = \hbar\bar{l} f_b$$

- Além disso, $\hat{L}^2 f_b = \lambda f_b$
- Vamos agora aplicar a relação $\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar L_z$ a f_b:

$$\hat{L}^2 f_b = \hat{L}_+\cancelto{0}{\hat{L}_- f_b} + \hat{L}_z^2 f_b - \hbar L_z f_b$$

$$\lambda f_b = \hbar^2 \bar{l}^2 f_b - \hbar^2 \bar{l} f_b$$

  de forma que

$$\boxed{\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1)}$$

  que fornece o autovalor de $\hat{L}^2$ (λ) em função do mínimo autovalor de $\hat{L}_z$ ($\hbar\bar{l}$)

Relação entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$

- Das duas equações para λ,
  $$\lambda = \hbar^2 l(l+1)$$
  e
  $$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1)$$
  descobrimos que
  $$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$$
  cujas soluções são
  $$\bar{l} = l+1 \qquad \text{ou} \qquad \bar{l} = -l$$

Exercício

27. Mostre que a relação $l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$ fornece $\bar{l} = l+1$ ou $\bar{l} = -l$.

- $\bar{l} = l+1$ não faz sentido: $\bar{l}$ é o mínimo autovalor, não pode ser maior que l, o máximo!!!
  - veja que l e $\bar{l}$ não podem ser complexos (*por quê?*)

Relação entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$

- Das duas equações para λ,
$$\lambda = \hbar^2 l(l+1)$$
e
$$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1)$$
descobrimos que
$$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$$
cujas soluções são
$$\bar{l} = l+1 \qquad \text{ou} \qquad \bar{l} = -l$$

Exercício

27. Mostre que a relação $l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$ fornece $\bar{l} = l+1$ ou $\bar{l} = -l$.

- $\bar{l} = l+1$ não faz sentido: $\bar{l}$ é o mínimo autovalor, não pode ser maior que l, o máximo!!!
  - veja que l e $\bar{l}$ não podem ser complexos (*por quê?*) porque são autovalores de operadores hermitianos, que representam observáveis

Relação entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$

- Das duas equações para λ,
$$\lambda = \hbar^2 l(l+1)$$
e
$$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1)$$
descobrimos que
$$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$$
cujas soluções são
$$\bar{l} = l+1 \qquad \text{ou} \qquad \bar{l} = -l$$

Exercício

27. Mostre que a relação $l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$ fornece $\bar{l} = l+1$ ou $\bar{l} = -l$.

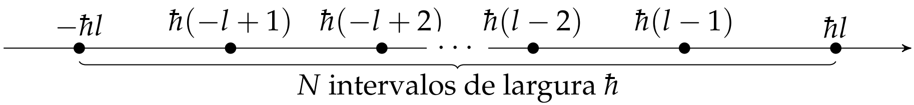
- $\bar{l} = l+1$ não faz sentido: $\bar{l}$ é o mínimo autovalor, não pode ser maior que l, o máximo!!!
  - veja que l e $\bar{l}$ não podem ser complexos (*por quê?*) porque são autovalores de operadores hermitianos, que representam observáveis
- Portanto, é preciso que
$$\boxed{\bar{l} = -l}$$

Autovalores de $\hat{L}_z$

- Vamos agora recapitular: para cada autovalor λ de $\hat{L}^2$,
  - o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$ é $-\hbar l$
  - o maximo autovalor de $\hat{L}_z$ é $\hbar l$
  - os demais autovalores μ vêm do operador levantamento $\hat{L}_+$ aplicado a qualquer autoestado f:

$$\hat{L}_z(L_+ f) = (\mu + \hbar)\hat{L}_+ f$$

  - ou seja, um autovalor é sempre $\hbar$ a mais que o anterior
- Com isso, os autovalores de $\hat{L}_z$ são $-\hbar l, -\hbar(-l+1), \ldots, \hbar(l-1), \hbar l$
- $\Rightarrow$ Para cada l, existem $2l+1$ possíveis valores de μ
  - podemos então escrever $\mu = m\hbar$
- Graficamente:



- Se (ver figura acima) existem N intervalos entre $-\hbar l$ e $\hbar l$, cada um de largura $\hbar$, é preciso que

$$\hbar l - (-\hbar l) = N\hbar$$

ou seja,

$$l = \frac{N}{2}$$

Autovalores de $\hat{L}_z$

- Do que vimos, os autovalores de $\hat{L}_z$ são $\mu = m\hbar$, com $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$ e tal que

$$l = \frac{N}{2}$$

  - pode apostar que não é por coincidência que usamos as letras m e l !!!

- Mas N é um número inteiro não negativo (número de intervalos entre o máximo e o mínimo autovalor de $\hat{L}_z$), o que impões as seguintes condições sobre l:

$$l = \begin{cases} 0, 1, 2, \ldots, & N \text{ par} \\ {}^1/_2, {}^3/_2, {}^5/_2, \ldots, & N \text{ ímpar} \end{cases}$$

- Ou seja, l é um inteiro (N par) ou um **semi-inteiro** (N ímpar)
- Podemos indexar as autofunções de $\hat{L}_z$ usando os **números quânticos** l e m: f_l^m, tal que

$$\boxed{\hat{L}_z f_l^m = m\hbar f_l^m}$$

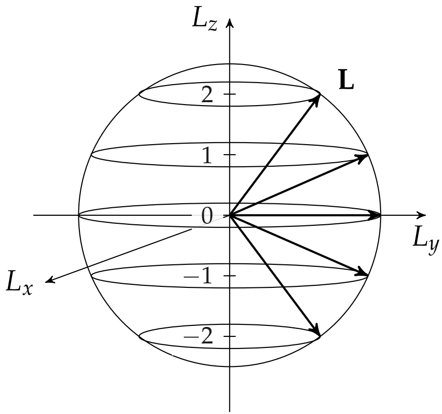
- Mas, como vimos, essas também são autofunções simultâneas de $\hat{L}^2$:

$$\boxed{\hat{L}^2 f_l^m = l(l+1)\hbar^2 f_l^m}$$

- Falta "apenas" encontrar esses autoestados! (Lembre do *spoiler alert* do slide 5)

Quantização de L_z

- A figura ilustra, para $l = 2$, a **quantização** da componente L_z (em unidades de $\hbar$):
  - nesse caso, os valores permitidos para $L_z = m\hbar$ são $-2\hbar$, $-\hbar$, 0, $+\hbar$ e $+2\hbar$
  - já o valor de L^2 é $2(2+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$ e portanto $L = \hbar\sqrt{6} \approx 2{,}449\hbar > 2\hbar$
    - $\Rightarrow$ geralmente, L é maior que L_z; são iguais apenas no caso trivial $l = 0$

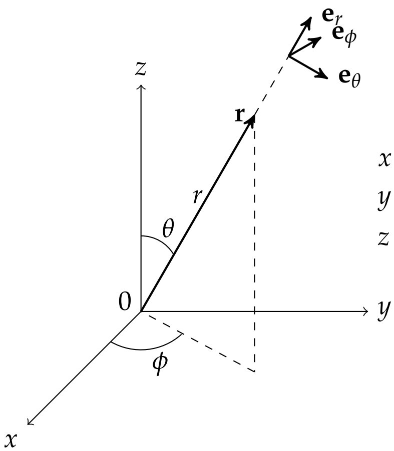


- As setas indicam algumas possíveis direções do momento angular **L** (com $l = 2$)
- Como $\hat{L}^2$ comuta com $\hat{L}_z$, é possível medir L (o módulo de **L**) e L_z simultaneamente
  - antes da medição, como usual, o sistema se encontra numa superposição dos autoestados f_l^m
- Por outro lado, L_x L_y e L_z não comutam (são incompatíveis) $\Rightarrow$ não é possível medir os três simultaneamente $\Rightarrow$ não sabemos a direção do momento angular!
- Os círculos de latitude na figura indicam a indeterminação na direção do momento angular

Plano de aula

Coordenadas esféricas

tudo o que você sempre quis saber mas tinha medo de perguntar…



$$x = r \operatorname{sen}\theta\cos\phi$$
$$y = r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$$
$$z = r\cos\theta$$

$$\mathbf{e}_r = \operatorname{sen}\theta\cos\phi\,\mathbf{i} + \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\phi\,\mathbf{j} + \cos\theta\,\mathbf{k}$$
$$\mathbf{e}_\theta = \cos\theta\cos\phi\,\mathbf{i} + \cos\theta\operatorname{sen}\phi\,\mathbf{j} - \operatorname{sen}\theta\,\mathbf{k}$$
$$\mathbf{e}_\phi = -\operatorname{sen}\phi\,\mathbf{i} + \cos\phi\,\mathbf{j}$$

$$\nabla = \mathbf{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathbf{e}_\phi\frac{1}{r\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\theta} = -\operatorname{sen}\theta\cos\phi\,\mathbf{i} - \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\phi\,\mathbf{j} - \cos\theta\,\mathbf{k}$$
$$\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\phi} = -\cos\theta\operatorname{sen}\phi\,\mathbf{i} + \cos\theta\cos\phi\,\mathbf{j}$$
$$\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\theta} = 0$$
$$\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\phi} = -\cos\phi\,\mathbf{i} - \operatorname{sen}\phi\,\mathbf{j}$$

$$\mathbf{e}_\theta\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\theta} = 0 \qquad \mathbf{e}_\phi\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\theta} = 0$$
$$\mathbf{e}_\theta\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\phi} = 0 \qquad \mathbf{e}_\phi\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\phi} = \cos\theta$$
$$\mathbf{e}_\theta\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\theta} = 0 \qquad \mathbf{e}_\phi\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\theta} = 0$$
$$\mathbf{e}_\theta\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\phi} = -\cos\theta \qquad \mathbf{e}_\phi\cdot\frac{\partial\mathbf{e}_\phi}{\partial\phi} = 0$$

Momento angular em coordenadas esféricas

- A quantização do momento angular fornece

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \qquad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$$

  sendo $\hat{\mathbf{p}}$ o operador momento

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$$

  ao passo que o vetor posição é

$$\mathbf{r} = r\,\mathbf{e}_r$$

- Portanto

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\,\mathbf{r} \times \nabla$$

- Mas o operador gradiente em coordenadas esféricas é

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

  e com isso temos

$$\mathbf{r} \times \nabla = (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r) r \frac{\partial}{\partial r} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta)\frac{\partial}{\partial \theta} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi)\frac{1}{\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

- Mas

$$\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r = 0\,, \qquad \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_\phi\,, \qquad \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi = -\mathbf{e}_\theta$$

  e então

$$r \times \nabla = \mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

- Finalmente, o operador momento angular é dado por

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)}$$

O operador $\hat{L}_z$ em coordenadas esféricas

- L_z é a projeçao de $\mathbf{L}$ na direção z:

$$\hat{L}_z = \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{k}$$

- Com isso,

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left[(e_\phi \cdot \mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{k}) \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

- Mas

$$\mathbf{e}_\phi \cdot \mathbf{k} = 0 \, , \qquad \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{k} = - \operatorname{sen} \theta$$

- Portanto, finalmente,

$$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}}$$

Exercício

28. Encontre expressões para os operadores $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_+$ e $\hat{L}_-$.

O operador $\hat{L}^2$ em coordenadas esféricas

- O operador $\hat{L}^2$ é dado por
$$\hat{L}^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$$
sendo que, como vimos,
$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$
- Assim:
$$\hat{L}^2 = \left[-i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right] \cdot \left[-i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right]$$
- Usando a distributiva, temos
$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \mathbf{e}_\theta \cdot \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \mathbf{e}_\theta \cdot \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right]$$
- Vamos simplificar cada um dos termos usando o que sabemos sobre coordenadas esféricas:
$$\mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_\phi}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \cdot \mathbf{e}_\phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$
$$\mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \mathbf{e}_\phi \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial \theta} \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \mathbf{e}_\phi \cdot \mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = 0$$
$$\mathbf{e}_\theta \cdot \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \left[\mathbf{e}_\theta \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_\phi}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{e}_\phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = -\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}$$
$$\mathbf{e}_\theta \cdot \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\mathbf{e}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta} \left[\mathbf{e}_\theta \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} + \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{e}_\theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

O operador $\hat{L}^2$ em coordenadas esféricas

- Usando todos os resultados do slide anterior:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$

- No entanto, você pode verificar que

$$\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

  e com isso, finalmente, escrevemos o operador $\hat{L}^2$ como

$$\boxed{\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]}$$

Autoestados de $\hat{L}^2$

- Já vimos que os autovalores de $\hat{L}^2$ são dados por

$$l(l+1)\hbar^2$$

(*l* inteiro ou semi-inteiro) e seus autoestados são f_l^m tal que

$$\hat{L}^2 f_l^m = l(l+1)\hbar^2 f_l^m$$

ou seja,

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] f_l^m = l(l+1)\hbar^2 f_l^m$$

- Mas, da aula “Mecânica Quântica em 3D,” essa é exatamente a EDO (que chamamos de *equação angular*) para encontrar os harmônicos esféricos Y_l^m

$$\boxed{\text{Os autoestados do operador } \hat{L}^2 \text{ são os harmônicos esféricos } Y_l^m(\theta,\phi)}$$

Autoestados de $\hat{L}_z$

- As autofunções f_l^m são compartilhadas pelo operador $\hat{L}_z$, que tem por autovalores $m\hbar$ ($m = -l, \ldots, +l$) de forma que

$$\hat{L}_z f_l^m = m\hbar f_l^m$$

ou seja,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} f_l^m = m\hbar f_l^m$$

- Vamos derivar em relação a ϕ e ver o que acontece:

$$-i\hbar \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} f_l^m = m\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} f_l^m = im^2\hbar f_l^m$$

ou seja,

$$\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} f_l^m = -m^2 f_l^m$$

- Mas essa equação é equivalente à equação azimutal (aquela que usamos para achar a função $\Phi(\phi)$ na aula "Mecânica Quântica 3D")
  - ou seja, também já resolvemos essa equação!

$$\boxed{\text{Os autoestados do operador } \hat{L}_z \text{ são os harmônicos esféricos } Y_l^m(\theta, \phi)}$$

- Obs.: como $\hat{L}_z$ é um operador diferencial apenas em ϕ, toda a dependência em θ pode ser eliminada de Y_l^m, restando apenas $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$, que é uma versão simplificada do autoestado de $\hat{L}_z$

Autoestados do hamiltoniano

- Não é difícil mostrar que, para um potencial central, o hamiltoniano comuta com $\hat{L}_z$ (e também com $\hat{L}_x$ e $\hat{L}_y$):
$$\left[\hat{H},\hat{L}_z\right]=0$$
- Portanto, as autofunções de $\hat{H}$ são as mesmas que para $\hat{L}^2$ e para $\hat{L}_z$
- No entanto, $\hat{H}$ tem uma dependência em r, e não apenas θ e ϕ como $\hat{L}^2$
- $\Rightarrow$ precisamos escrever as autofunções de $\hat{H}$ acrescentando uma parte radial, como vimos:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_n^l(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

- Assim, quando resolvemos a Equação de Schrödinger por separação de variáveis, construímos autofunções simultâneas de três operadores $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ e L_z que comutam entre si:

$$\hat{H}\psi_{nlm}=E_n\psi_{nlm}\,,\qquad \hat{L}^2\psi_{nlm}=l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm}\,,\qquad \hat{L}_z\psi_{nlm}=m\hbar\psi_{nlm}$$

- Veja que podemos também escrever de forma mais compacta a ESIT em coordenadas esféricas:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\hat{L}^2\right]\psi+V\psi=E\psi}$$

Reviravolta na história

Plot twist

- No entanto, há uma **reviravolta na história:**
  1. o número quântico l (e portanto também m), na teoria algébrica do momento angular, pode assumir valores **inteiros** ou **semi-inteiros**
  2. mas a separação de variáveis permite apenas valores **inteiros** de l (e m)
- Poderíamos descartar como sempre falsos os valores semi-inteiros
  - **mas esse seria um enorme erro!**
  - as soluções semi-inteiras tem grande importância em outro contexto, como veremos na próxima aula

Exercícios

29. Duas partículas de massa m estão ligadas às extremidades de uma haste rígida e sem massa de comprimento a. O sistema é livre para rotacionar em três dimensões em torno do centro da haste (que, porém, permanece fixo).
    (a) Mostre que as energias permitidas para esse **rotor rígido** são

    $$E_j = j(j+1)\frac{\hbar^2}{ma^2}, \qquad (j = 0, 1, 2, \ldots)$$

    Dica: escreva primeiramente a energia e o momento angular do sistema clássico equivalente.
    (b) Quais são as autofunções normalizadas para esse sistema?
    (c) Qual é a degenerescência do j-ésimo nível de energia?
30. Considere os observáveis $A = x^2$ e $B = L_z$.
    (a) Monte o princípio da incerteza para $\sigma_A \sigma_B$.
    (b) Avalie σ_B no estado ψ_{nlm} do hidrogênio.
    (c) O que você pode concluir sobre $\langle xy \rangle$ nesse estado?
31. Se você pudesse, de alguma maneira, medir o observável $L_x^2 + L_y^2$ no estado ψ_{433} do átomo de hidrogênio, quais valores (ou valor) poderia obter, e com quais probabilidades?