

AULA 2

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 2

3.0) Grupo de rotações

Vamos considerar agora o conjunto de todas as rotações R próprias (excluindo reflexões) de um vetor \vec{k} em \mathbb{E}_{3D} . Esse conjunto deixa invariante a norma de qualquer vetor \vec{k} e forma um grupo de Lie não-Abeliano: $SO(3)$, o grupo especial ortogonal de dimensão 3.

Se \vec{k} é um vetor coluna com 3 entradas, as rotações são produzidas por matrizes ortogonais 3×3 de determinante 1 (especial, próprias).

Como já vimos antes (MQI), para cada elemento R existe uma transformação unitária $D(R)$ nos estados do espaço de Hilbert (\mathcal{H}) que satisfaz as leis de composição

$$\boxed{\mathbb{E}_{3D}}$$

$$R_1 R_2 = R$$

$$R R^{-1} = R^{-1} R = I$$

$$\boxed{\mathcal{H}}$$

$$D(R_1) D(R_2) = D(R_1 R_2) \quad (3.0)$$

$$D(R) D(R^{-1}) = I$$

$$D(R^{-1}) = D^\dagger(R) \quad (3.1)$$

Definição: Qualquer conjunto de matrizes que satisfaz essas leis de composição (3.0) e (3.1) é uma representação de $SO(3)$

ex: as matrizes 3×3 que transf. \vec{k} são uma representação de $SO(3)$.

Qualquer rotação de $SO(3)$ é uma rotação por um ângulo θ em torno de uma direção \vec{n} (vetor unitário): $R_{\vec{n}}(\theta)$

Qualquer vetor \vec{n} depende de 2 parâmetros, logo qualquer elemento de $SO(3)$ é parametrizado por 3 parâmetros contínuos

Vimos em M.Q.I que

$$D(R) = e^{-i\vec{\omega} \cdot \vec{J}} \quad (3.2a)$$

$$\vec{\omega} = \theta \vec{n} \quad (3.2b)$$

onde J_i são os geradores infinitesimais das rotações que obedecem a álgebra de Lie do grupo

$$[J_i, J_j] = i \epsilon_{ijk} J_k \quad (3.3)$$

As matrizes 3×3 ortogonais não formam a representação vá
trivial de dimensão mais baixa do grupo. De fato já vimos
que esta é dada pelas matrizes unitárias de dim. 2:

$$D^{1/2}(R) = e^{-\frac{i}{2} \vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}} = \cos \frac{\theta}{2} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.4)$$

Claramente $D^{1/2}(R)$ satisfaz as leis de composição (3.0),
mas esta representação tem uma peculiaridade: é uma
representação de valor duplo em $SO(3)$. Para uma rotação $\theta = 2\pi$
em torno de qualquer eixo, que retorna qualquer vetor em
 \mathbb{C}_{3D} para sua orientação original, $D^{1/2} = -1!$

3.1) $SO(3)$ e $SU(2)$

Qualquer vetor real em \mathbb{C}_{3D} pode ser representado
por uma matriz de dim 2.

ex: \vec{r}

$$X = \vec{r} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

onde

$$\det X = -(x^2 + y^2 + z^2) \quad (3.6a)$$

$$\text{Tr } X = 0 \quad (3.6b)$$

$$X = X^\dagger \quad (3.6c)$$

Logo qualquer transformação contínua linear de X que deixe o seu determinante e traço inalterados e o mantenha Hermitiano, corresponde a uma rotação.

Considere

$$X' = \Omega^\dagger X \Omega \quad (3.7)$$

$$X'^\dagger = (\Omega^\dagger X \Omega)^\dagger = \Omega^\dagger X^\dagger \Omega = \Omega^\dagger X \Omega = X$$

$$\text{Tr } X' = \text{Tr}(\Omega^\dagger X \Omega) = \text{Tr}(\Omega \Omega^\dagger X)$$

$$\det X' = \det \Omega^\dagger \det X \det \Omega = |\det \Omega|^2 \det X$$

Assim se $\Omega \Omega^\dagger = 1$ então Ω satisfaz todas as condições, logo qualquer matriz unitária de dim 2 realizará uma rotação em um vetor via

$$X' = \Omega^\dagger X \Omega !$$

Podemos escrever qualquer matriz de dim 2 como:

$$\Omega = \varphi_0 + i \vec{\sigma} \cdot \vec{\varphi}$$

se Ω é unitária

$$\begin{aligned} \Omega \Omega^\dagger &= |\varphi_0|^2 + |\vec{\varphi}|^2 + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{\varphi} \varphi_0^* - \vec{\varphi}^* \varphi_0) + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{\varphi} \times \vec{\varphi}^*) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (14)$$

Onde usamos

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

os coeficientes de $\vec{\sigma}$ se anulam se Q_0 e \vec{Q} são reais, a parte não fase global

$$\Omega = e^{i\alpha} (Q_0 + i \vec{\sigma} \cdot \vec{Q}) \quad (3.8a)$$

$$|Q_0|^2 + |\vec{Q}|^2 = 1 \quad (3.8b)$$

Vamos esquecer a fase global pois ela não sobrevive à transformação. A condição (3.8b) reduz de 4 para 3 variáveis i.e. 3 números reais. Existe uma infinidade de escolhas.

Ex: Tomemos $\vec{r} = (x, y, 0)$ e uma rotação em torno do eixo z de um ângulo θ no sentido horário

$$\Omega = \cos \frac{\theta}{2} - i \sigma_3 \sin \frac{\theta}{2} \quad Q_0 = \cos \frac{\theta}{2} \quad \vec{Q} = -\hat{z} \sin \frac{\theta}{2}$$

$$\chi' = \Omega^\dagger \chi \Omega \quad (\text{Verifique!})$$

uma rotação em torno de qualquer eixo

$$Q_0 = \cos \frac{\theta}{2} \quad \vec{Q} = -\vec{n} \sin \frac{\theta}{2} \quad \therefore \boxed{\Omega(R) = \mathcal{D}^{1/2}(R)} \quad (3.9)$$

Cayley-Klein parameters

$$\mathcal{D}^{1/2}(R) = \begin{pmatrix} Q_0 + i Q_3 & i Q_1 + Q_2 \\ i Q_1 - Q_2 & Q_0 - i Q_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \vec{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$$

$$a = \cos \frac{\delta}{2} - \sin \frac{\delta}{2} \cos \theta \quad (3.11a)$$

$$b = -i e^{-i\phi} \sin \theta \sin \frac{\delta}{2} \quad (3.11b) \quad \text{para uma rotação por um ângulo } \delta.$$

$$D^{1/2}(R^{-1}) = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$D^{1/2}(R_2) D^{1/2}(R_1) = D^{1/2}(R_2 R_1)$$

$$= \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ -b_2^* & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ -b_1^* & a_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 a_1 - b_2 b_1^* & a_2 b_1 + b_2 a_1^* \\ -b_2^* a_1 - a_2^* b_1^* & -b_2^* b_1 + a_2^* a_1^* \end{pmatrix}$$

$$= (a_2, b_2) \times (a_1, b_1) = (a_2 a_1 - b_2 b_1^*, a_2 b_1 + b_2 a_1^*)$$

assim $(a, b)^{-1} = (a^*, -b)$

$$\delta = 0, 2\pi \quad a = \pm 1 \quad b = 0$$

↑
corresponde à identidade
de $SO(3)$

↑ dois conj. de parâmetros distintos

De forma geral o par de matrizes $D^{1/2}(\pm a, \pm b)$ fornece a mesma rotação de um vetor pois $X \rightarrow X'$ é bilinear em $D^{1/2}$ e logo as matrizes $D^{1/2}(R)$ são uma representação de valor duplo do grupo de rotação $SO(3)$

Essas matrizes fornecem uma representação de valor único de $SU(2)$ o grupo de transformações lineares de vetores complexos com componentes (u_1, u_2) no espaço \mathbb{C}_2

$$D^{1/2}(a, b) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a u_1 + b u_2 \\ -b^* u_1 + a^* u_2 \end{pmatrix}$$

que deixa $|u_1|^2 + |u_2|^2$ invariante

(16)

$SU(2)$ é o grupo especial de matrizes unitárias de dimensão 2, $\det D^{1/2} = 1$ (sem a fase $e^{i\alpha}$ de definição de Ω). Quando a fase é incluída o grupo é chamado de $U(2)$ - grupo unitário bidimensional.

$D^{1/2}(\pm a, \pm b)$ produz 2 vetores distintos $(\pm u_1', \pm u_2') \in \mathbb{C}_2$ enquanto que produz o mesmo vetor real em 3D.

3.2) Representações irredutíveis de $SU(2)$

Para qualquer grupo G com elementos (g_1, g_2, \dots) um conjunto de matrizes $\{M_K(g)\}$ de dimensão K que satisfaz a lei de composição

$$M_K(g_2) M_K(g_1) = M_K(g_2 g_1) \quad (3.13)$$

forma uma representação de G .

Se existe uma transf. unitária W que não depende de g para a qual $\forall g$

$$W^\dagger M_K W = \begin{pmatrix} M_m & 0 \\ 0 & M_n \end{pmatrix}$$

a representação é redutível. Se não existe W que transforme M_K na forma bloco diagonal, a representação é irredutível.

$D^{1/2}(a, b) \equiv \Omega(a, b)$ é a representação irredutível de dim. 2 de $SU(2)$ pois $e^{\frac{-i}{2} \sigma \cdot \hat{n}}$ só pode ser (17)

colocado na forma diagonal por uma transf. unitária que depende de \vec{n} . Veremos que as representações irreduzíveis de dimensão maior podem ser construídas de $D^{1/2}$ essencialmente pela adição de momento angular.

Vamos considerar um sistema físico arbitrário com um operador de mom. angular \vec{J} , e um espaço de Hilbert \mathcal{H} gerado por $|\alpha j m\rangle$ $j = 0, 1/2, 1, \dots$ $m = -j, -j+1, \dots, j$. \vec{J} não precisa ser const. de movimento.

Sob rotações R :

$$|\alpha j m\rangle \longrightarrow |\alpha j m; R\rangle = D(R) |\alpha j m\rangle$$

$$D(R) |\alpha j m\rangle = \sum_{\alpha'} \sum_{j' m'} |\alpha' j' m'\rangle \langle \alpha' j' m' | D(R) | \alpha j m \rangle \quad (3.14)$$

mas $D(R) = e^{-i\theta \vec{n} \cdot \vec{J}}$ não muda j , além disso todos os elementos de matriz de \vec{J} são completamente determinados por \vec{J} por causa das regras de comutação do momento angular \Rightarrow os elementos de matriz de $D(R)$ são diagonais em j e totalmente independentes de α . Definindo

$$D_{m m'}^j(R) \equiv \langle j m | D(R) | j m' \rangle \quad (3.15)$$

$$|j m; R\rangle \equiv D(R) |j m\rangle = \sum_{m'} |j m'\rangle D_{m' m}^j(R) \quad (3.16)$$

as quantidades $D_{m'm}^j(R)$ formam a matriz de rotação $D^j(R)$ de dimensão $(2j+1)$. Essas matrizes são universais, dependem apenas dos autovalores do operador de momento angular que gere a rotação R e são as mesmas para todos os sistemas que possuem o estado de momento angular em questão.

$$D_{mm'}^j(R_2 R_1) = \sum_{m''} D_{m m''}^j(R_2) D_{m'' m'}^j(R_1) \quad (3.17)$$

se $R_2^{-1} = R_1$

$$D_{mm'}^j(I) = \delta_{mm'}$$

$$\sum_{m''} D_{m m''}^j(R) D_{m'' m'}^j(R^{-1}) = \delta_{mm'}$$

mas D^j é uma matriz unitária, então

$$\sum_{m''} D_{m m''}^j(R) [D_{m'' m'}^j(R)]^* = \delta_{mm'}$$

$$\therefore D_{m m'}^j(R^{-1}) = [D_{m' m}^j(R)]^* \quad (3.18)$$

Como já vimos D^j é irredutível, não há sub-espço invariante. Pode ser mostrado que ~~para~~ uma representação unitária ou é irredutível ou completamente redutível (existe um sub-espço invariante e o seu complementar é também invariante).

3.2.1) Construção Explícita

Vamos construir $D^{\frac{1}{2}}$ a partir de $D^{\frac{1}{2}}$

Sejam u_1, u_2 vetores de base de representação de dim 2 de $SU(2)$

$$D^{\frac{1}{2}}(a, b) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a u_1 + b u_2 \\ -b^* u_1 + a^* u_2 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

u_1 se transforma sob rotação como $|j = \frac{1}{2} \quad m = \frac{1}{2}\rangle$

u_2 se transforma sob rotação como $|j = \frac{1}{2} \quad m = -\frac{1}{2}\rangle$

Vamos construir os polinômios $u_1^p u_2^q$ que, com escolhas adequadas de p e q , transformem-se como os estados $|j, m\rangle$

Considere

$$\Phi_{jm} = c_{jm} u_1^{j+m} u_2^{j-m} \quad (3.20)$$

vamos mostrar que Φ_{jm} se transforma como $|j, m\rangle$ desde que c_{jm} sejam escolhidas de forma adequada, ou seja,

$$\underline{J}_+ \Phi_{jm} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \Phi_{j, m+1} \quad (3.21)$$

Podemos escrever os operadores de momento angular em termos das variáveis (u_1, u_2)

$$J_+ = u_1 \frac{\partial}{\partial u_2} \quad J_- = u_2 \frac{\partial}{\partial u_1} \quad J_z = \frac{1}{2} \left(u_1 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_2 \frac{\partial}{\partial u_2} \right)$$

$$\Phi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = u_1 \quad \Phi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} = u_2$$

$$J_z \Phi_{jm} = m \Phi_{jm} \quad J_z \Phi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{1}{2} u_1 = \frac{1}{2} \Phi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}$$

$$J_z \Phi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} u_2 = -\frac{1}{2} \Phi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} \quad J_+ \Phi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = 0 \quad J_+ \Phi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} = J_+ u_2 = u_1 \Phi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} \quad (20)$$

$$\underline{J}_{\pm} \Phi_{jm}(u_1, u_2) = \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} \Phi_{j, m \pm 1}$$

pois $j(j+1) - m(m \pm 1) = (j \mp m)(j \pm m + 1)$

É possível mostrar que a parte nome fosse arbitrária multi-
vante

$$\Phi_{jm}(u_1, u_2) = \frac{u_1^{j+m} u_2^{j-m}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}} \quad (3.22)$$

i.e.

$$\underline{J}_+ \Phi_{jm} = u_1 \frac{\partial}{\partial u_2} \Phi_{jm} = j-m \frac{u_1^{j+m+1} u_2^{j-m-1}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}}$$

$$= u_1^{j+m+1} u_2^{j-m-1} \sqrt{\frac{(j-m)(j-m)(j+m+1)}{(j+m+1)! (j-m)(j-m-1)!}} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \Phi_{j, m+1} \text{ etc.}$$

Agora precisamos avaliar a transf de Φ_{jm} . Lembremos

que $|jm; R\rangle \equiv \mathcal{D}(R) |jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^j(R)$

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \mathcal{D}_{11} + u_2 \mathcal{D}_{21} \\ u_1 \mathcal{D}_{12} + u_2 \mathcal{D}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 a - u_2 b^* \\ u_1 b + u_2 a^* \end{pmatrix}$$

pois $\mathcal{D}^{1/2}(R) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_{11} & \mathcal{D}_{12} \\ \mathcal{D}_{21} & \mathcal{D}_{22} \end{pmatrix}$ para ser consistente com a def $\mathcal{D}_{m'm}^j$!

$$\begin{aligned} \Phi_{jm}(u_1', u_2') &= \sum_{m'} \Phi_{jm'}(u_1, u_2) \mathcal{D}_{m'm}^j(a, b) \\ &= \frac{(u_1 a - u_2 b^*)^{j+m} (u_1 b + u_2 a^*)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}} \quad (3.23) \end{aligned}$$

(21)

O teorema binomial fornece

$$D_{jm}^{j(u_1, u_2)} = \sum_{\mu, \nu} \binom{j+m}{\mu} \binom{j-m}{\nu} \frac{(u_1 a)^{j+m-\mu} (-u_2 b^*)^\mu (u_1 b)^{j-m-\nu}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}}$$

$$(u_2 a^*)^\nu \quad (3.24)$$

pois $(x+y)^n = \sum_{\mu=0}^n \binom{n}{\mu} x^{n-\mu} y^\mu$

Comparando os termos

$$\sum_{m'} \frac{u_1^{j+m'} u_2^{j-m'}}{\sqrt{(j-m')! (j+m')!}} D_{m'm}^{j(a,b)} = \sum_{\mu=0}^{j+m} \sum_{\nu=0}^{j-m} \frac{\binom{j+m}{\mu} \binom{j-m}{\nu} u_1^{2j-\mu-\nu}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}}$$

$$u_2^{\mu+\nu} a^{j+m-\mu} a^{*\nu} b^{j-m-\nu} (-b^*)^\mu$$

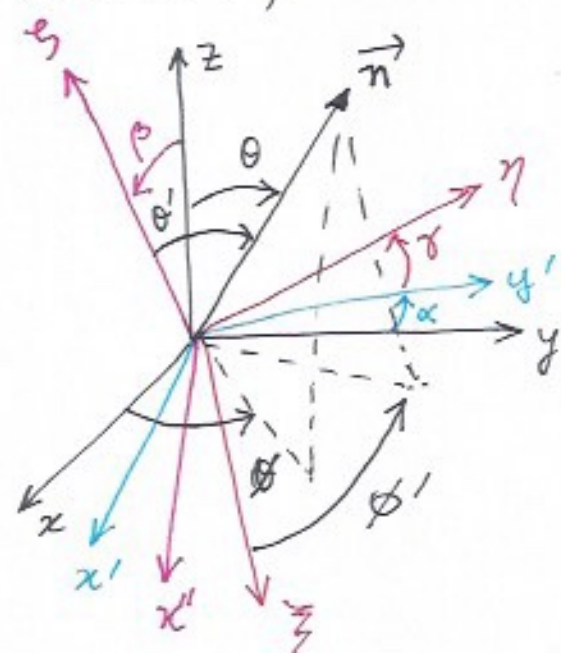
$$\begin{aligned} 2j-\mu-\nu &= j+m' \\ \mu+\nu &= j-m' \end{aligned} \Rightarrow \mu, \nu = j-m'-\mu$$

$$D_{m m'}^j(a,b) = \frac{\sqrt{(j+m)! (j-m)!}}{\sqrt{(j+m')! (j-m')!}} \sum_{\mu=0}^{j+m'} \binom{j+m'}{\mu} \binom{j-m'}{j-m-\mu}$$

$$a^{j+m'-\mu} (a^*)^{j-m-\mu} (-b^*)^\mu (b)^{m-m'+\mu} \quad (3.25) \quad (\text{trocando } m \rightarrow m')$$

Esse é o resultado que procurávamos, i.e. as representações irredutíveis de $SO(3)$.

Podemos também usar os ângulos de Euler (α, β, γ) para parametrizar uma rotação.



$$K = (x, y, z) \rightarrow K' = (\xi, \eta, \zeta)$$

$$\vec{n} = (\theta, \phi) \quad \vec{n}' = (\theta', \phi')$$

$$0 \leq \alpha, \gamma \leq 2\pi$$

$$0 \leq \beta \leq \pi$$

a rotação R do referencial $K = (x, y, z)$ para $K' = (\xi, \eta, \zeta)$ é realizada por três rotações sucessivas:

$$D(R) = D_z(\gamma) D_y(\beta) D_z(\alpha)$$

em três referenciais diferentes. É possível mostrar (lista) que a rotação $K \rightarrow K'$ também pode ser descrita por três rotações com relação ao mesmo referencial K

$$D(R) = D_z(\alpha) D_y(\beta) D_z(\gamma) \quad (3.26)$$

assim $D_{mm'}^j(R) = \langle j, m | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | j, m' \rangle$

$$= e^{-i\alpha m} \underbrace{\langle j, m | e^{-i\beta J_y} | j, m' \rangle}_{d_{mm'}^j(\beta)} e^{-i\gamma m'} \quad (3.27)$$

para calcular $d_{mm'}^j(\beta)$ usamos (3.25)

como $\vec{n} = (0, 1, 0) = \hat{y}$ $a = \cos \frac{\beta}{2}$ $b = -\sin \frac{\beta}{2}$

$$d_{mm'}^j(\beta) = \sqrt{\frac{(j+m)! (j-m)!}{(j+m')! (j-m')!}} \sum_{\mu} \binom{j+m'}{\mu} \binom{j-m'}{j-m-\mu} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j+m'-m-2\mu} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m-m'+2\mu} (-1)^{m-m'+\mu} \quad (3.28)$$

Mostre que (lista) se $j=l$ (inteiro) e $m'=0$

$$D_{m0}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\beta, \alpha) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\vec{n}) \quad (3.29)$$

onde β é o ângulo polar e α o ângulo azimutal de \vec{n} em k .

As matrizes de rotação aparecem em inúmeras aplicações importantes, em funções de onda de moléculas e núcleos atômicos, em amplitudes de espalhamento de partículas com spin, em distribuições angulares de estados finais produzidos por transições radiativas e decaimentos.

Integrais sobre produtos de matrizes de rotação aparecem frequentemente (Gottfried, Cap 7.4(f))

Definição

$$\int dR = \int_0^\pi \frac{d\theta}{\sin \theta} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sin \theta} \int_0^{2\pi} \frac{d\delta}{\sin \theta} \sin^2 \frac{\delta}{2} \quad \vec{\omega} = \delta \vec{n}(\theta, \phi)$$

Todas as integrais de interesse saem a partir do seguinte:
 Seja $|a\rangle$ um estado arbitrário e $|a; R\rangle$ o estado rotado. Se tomarmos a média de $|a; R\rangle$ sobre todas as orientações, a única componente que pode sobreviver é $\langle 0|a\rangle$ esféricamente simétrico!

$$\int dR D(R) |a\rangle = |0\rangle \langle 0|a\rangle \quad (3.30)$$