Como já dizia o bom e velho Lidério Citrângulo, “Meus caros”, adentramos agora num terreno muito distinto daquele da Física clássica. Momento angular orbital, spin e o total muitas vezes não possuem um análogo clássico, sendo fruto de graus de liberdade internos. O spin eletrônico (férmions) altera não apenas a dinâmica como também introduz um vínculo entre vizinhos, o famigerado princípio de exclusão de Pauli. Já o spin de fótons (bósons) não apresentam tal propriedade mas permite a existência de “super” estados da matéria, como superfluidez, a formação de condensados de Bose-Einstein, e até mesmo a direção de espalhamento.

Durante esta semana, nosso objetivo é apresentar os principais conceitos associados com este tema. Começaremos com o mais simples dos operadores de momento angular: o orbital. Essa nova jornada certamente irá exigir dedicação e estudos muito extensos do que apresentado até então. **A fim de avaliar com precisão o desempenho corrente de cada aluno, e evitar deslizes futuros, esta lista deverá ser resolvida e encaminhada até a data 22 de Maio de 2015.** O desempenho da lista não será contabilizado na nota do aluno no curso, sendo tão somente instrumento de medida. Evite ultrapassar a marca de 10mins por item. Caso não consiga resolver as questões, anote suas dúvidas de modo legível, precisando a dificuldade encontrada. A submissão pode ser feita em grupo ou individualmente.

Exercício 1 Durante a última aula, estudamos a representação dos operadores associados à energia cinética em coordenadas esféricas:

$$\sum_{k=1}^{3} \frac{\mathbb{p}_k^2}{2m} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}. \tag{1}$$

Neste exercício, iremos fornecer as ferramentas para relacionar as quantidades a serem estudas nas teorias quânticas com aquelas da Mecânica Clássica. As grandezas em questão são o momento angular e a simetria por rotações contínuas. Como veremos num futuro próximo, estes conceitos existem mesmo em espaços de Hilbert onde as dimensões espaciais não são consideradas.

Para simplificar cálculos, considere *apenas o caso bidimensional* e, então, generalize para três ou mais dimensões. Em coordenadas polares (r, φ), as coordenadas (x, y) de um ponto são dadas por

$$x = r\cos\varphi, \qquad y = r\sin\varphi. \tag{2}$$

Se tal ponto representa a posição de um ponto material, então cada coordenada é uma função do tempo, $x = x(t)$ e $y = y(t)$. Consequentemente, as coordenadas polares também são parametrizadas pelo tempo, $r = r(t)$ e $\varphi = \varphi(t)$.

a) *Momento angular clássico*: Dado o vetor posição $\vec{r} = \vec{x} + \vec{y}$ e a velocidade $\vec{v} = \overrightarrow{\dot{x}} + \overrightarrow{\dot{y}}$, calcule o momento angular clássico $\vec{L}$ de um ponto material. Mostre que

$$\dot{\varphi}(t) = \frac{L}{mr^2}. \tag{3}$$

b) *Energia cinética*: Verifique a relação

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\dot{y}^2}{2} \to \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}. \tag{4}$$

c) Utilize a “receita” de Dirac na expressão acima. A receita é $\{q_i, p_j\} = \delta_{\text{ij}} \quad \to \quad [\mathbb{q}_i, \mathbb{p}_j] = i\hbar\delta_{\text{ij}}$, onde q_i é a i-ésima variável generalizada e p_j é o j-ésimo momento canônico de q_j. O que se pode concluir sobre L^2 e seu análogo na teoria quântica?

d) *Momento angular (orbital)*: Generalize suas conclusões para o caso tridimensional e compare seus resultados com a equação (1). Determine o operador $\mathbb{L}^2$ (que também é chamado de operador de Casimir ou envelope). Daqui em diante, considere sempre o caso tridimensional.

e) O operador $\mathbb{L}^2$ é hermitiano e possui um conjunto completo de autovetores, $|l,m\rangle$, tal que

$$\mathbb{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle. \tag{5}$$

Com base nessa afirmativa, o que se pode inferir sobre os valores de l? São números discretos ou reais? Inteiros, racionais ou irracionais? Quais as possíveis variáveis canônicas associadas a l? Justifique.

f) *Harmônicos esféricos:* O autoestado $|l,m\rangle$ de $\mathbb{L}^2$ possui a seguinte expansão:

$$|l,m\rangle = \int d\varphi d\theta \, \sin\theta \, Y_l^m(\theta,\varphi)|\theta,\varphi\rangle. \tag{6}$$

Utilizando seus resultados, calcule a projeção da equação (5) no estado $|\theta,\varphi\rangle$. A equação de autovalor é

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_l^m}{\partial\theta}\right)+ \\ +\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y_l^m}{\partial\varphi^2}+l(l+1)Y_l^m = 0. \tag{7}$$

Para resolver essa equação, suponha a solução do tipo separação de variáveis:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \Gamma_l^m(\theta)\Omega^m(\varphi). \tag{8}$$

i. Determine $\Omega^m(\varphi)$. Os autovalores m são inteiros ou semi-inteiros? Justifique.

ii. Determine $\Gamma_l^m(\theta)$. Escreva sua resposta utilizando os polinômios associados de Legendre, $P_l^m(\cos\theta)$.

g) Considere agora uma partícula sem spin se propagando livremente no interior de uma região esférica de diâmetro 2ρ (assuma um potencial positivo e infinito fora dessa região). O ket que descreve tal partícula é dado pela seguinte combinação linear,

$$|\psi\rangle = \sum_{l,m}\int_0^\rho dr\,\psi_{lm}(r)|r,l,m\rangle. \tag{9}$$

Calcule $\langle r,l,m|\mathbb{H}|\psi\rangle = E\langle r,l,m|\psi\rangle$ e encontre a equação diferencial ordinária para $\psi_{lm}(r)$.

h) *Bessel esférico (semi-inteiro)*: Faça a expansão da função de onda $\psi_{lm}(r)$ numa base da funções ortonormais $J_n^{lm}(r)$,

$$\psi_{lm}(r) = \sum_n c_{n,lm}J_n^{lm}(r), \tag{10}$$

e determine as equações de autovalor para cada $J_n^{lm}(r)$.

Exercício 2 Como vimos ao longo do curso, operadores da teoria quântica são geralmente fundamentados sobre suas contrapartes clássicas. O operador de Casimir ou $\mathbb{L}^2$ é interpretado como o módulo quadrado do vetor momento angular clássico, $\vec{L}\cdot\vec{L}$. Ora, mas $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ onde $L_i = \varepsilon_{ijk}\,x_j\,p_k$ ($\varepsilon_{\rm ijk}$ é o tensor anti-simétrico de Levi-Civita, a saber, $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{312} = \varepsilon_{231} = 1$ e $\varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = -1$) e as coordenadas são $x_1 = x, x_2 = y$ e $x_3 = z$.

a) Use a "receita" de Dirac ($x_k \to \mathbb{x}_k$ e $p_k \to \mathbb{p}_k$ onde $[\mathbb{x}_i,\mathbb{p}_j] = i\hbar\delta_{\rm ij}$) e calcule os operadores $\mathbb{L}_x$, $\mathbb{L}_y$ e $\mathbb{L}_z$.

b) Verifique as seguintes relações de comutação:

$$[\mathbb{L}_x,\mathbb{L}_y] = i\hbar\mathbb{L}_z, \tag{11}$$

$$[\mathbb{L}^2,\mathbb{L}_k] = 0 \quad (k = x,y,z). \tag{12}$$

Qual a implicação física destas expressões?

c) Na base angular $|\theta,\varphi\rangle$, o operador $\mathbb{L}_z$ é representado da seguinte maneira:

$$\mathbb{L}_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad . \tag{13}$$

Calcule $\langle\theta,\varphi|\mathbb{L}_z|l,m\rangle$, onde o autoestado $|l,m\rangle$ possui os harmônicos esféricos como autofunção.

Exercício 3 Considere o seguinte hamiltoniano,

$$\mathbb{H} = \left(\frac{\Omega}{\hbar}\right)\mathbb{L}^2 + \Delta\cos(2\pi\omega\mathbb{L}_z^2). \tag{14}$$

a) Quais são as dimensões físicas das grandezas Ω, Δ e ω?

b) Determine o espectro de energia de $\mathbb{H}$.

c) Uma partícula sem spin $|\psi\rangle$ é preparada de tal maneira que seu momento angular orbital é $l = 1$ e a combinação linear resultante é

$$|\psi\rangle = c_{\bar{1}}|1,-1\rangle + c_0|1,0\rangle + c_1|1,1\rangle. \tag{15}$$

Calcule as seguintes grandezas:

i. $\langle E\rangle = \langle\psi|\mathbb{H}|\psi\rangle$

ii. $\sigma^2 \; = \langle\psi|\mathbb{H}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\mathbb{H}|\psi\rangle^2$

iii. $\langle\theta,\varphi|\psi\rangle$

iv. $P(\theta,\varphi) = |\langle\theta,\varphi|\psi\rangle|^2$