Mecânica Quântica – Série 7

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2013/2014

(Versão de 6 de Novembro de 2013)

7.1 Mostre que, em coordenadas esféricas, se tem

$$L_{\pm} = \hbar\, e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

e

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

7.2 Os polinómios de Legendre $P_l(x)$ são definidos através da seguinte fórmula de **Rodrigues**

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

Verifique que

$$P_0 = 1, \quad P_1 = x, \quad P_2 = \frac{1}{2}\left(3x^2 - 1\right), \quad P_3 = \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right)$$

Confirme estes resultados com o comando `LegendreP[n, x]` do `Mathematica`.

7.3 Os polinómios associados de Legendre podem ser obtidos a partir dos polinómios de Legendre através da relação,

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x)$$

com os valores negativos de m obtidas através de

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\, P_l^m(x)$$

Obtenha os polinómios $P_l^m(x)$ para $l = 0, 1, 2$ e $-l < m < l$. Confirme os resultados usando o comando `LegendreP[n, m, x]` do `Mathematica`. Notar que a minha convenção dos sinais, é a mesma do `Mathematica`, mas não é exatamente a mesma do Gasiorowicz. Há um fator $(-1)^m$, designado por fase de *Condon-Shortley*, que eu incluo nos polinómios associados de Legendre e o Gasiorowicz inclui na definição das harmónicas esféricas. Assim a minha definição de harmónicas esféricas é

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

resultando no mesmo resultado do que o Gasiorowicz. Use o comando do `Mathematica`, `SphericalHarmonicY[l, m, teta, phi]`, para verificar esta afirmação.

7.4 Usando os resultados dos problemas anteriores mostre que se tem

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1)\right] P_l^m(\cos\theta) = 0$$

para $l = 0, 1, 2$ e $-l < m < l$.

∗ **7.5** *Gasiorowicz 7.1*

Considere a molécula de CN, que pode ser descrita como um halter consistindo de duas massas M_1 e M_2 ligadas por uma vara rígida de comprimento a. O halter roda num plano que em torno dum eixo que passa pelo centro de gravidade e perpendicular ao plano que contém as massas.

a) Escreva o Hamiltoniano que descreve o sistema

b) Qual é o espectro de energia?

c) Escreva a expressão para a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado.

∗ **7.6** *Gasiorowicz 7.3*

Calcule:

- $\langle l, m_1| L_x |l, m_2\rangle$
- $\langle l, m_1| L_y |l, m_2\rangle$

7.7 *Gasiorowicz 7.4*

Calcule:

- $\langle l, m_1| L_x^2 |l, m_2\rangle$
- $\langle l, m_1| L_y^2 |l, m_2\rangle$

Sugestão: Para esta problema e para o anterior escrever $L_{x,y}, L_{x,y}^2$ em termos de $L^2, L_z, L_\pm$.

∗ **7.8** *Gasiorowicz 7.5*

O Hamiltoniano para um rotor que tem simetria axial, isto é, em torno do eixo dos z, é dado por

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_3} \tag{1}$$

a) Quais são os valores próprios de H?

b) Faça um esquema do espectro admitindo que $I_1 > I_3$

c) Qual é o espectro no limite $I_1 \gg I_3$?

7.9 *Gasiorowicz 7.6*

Use os operadores de descida,

$$L_- = \hbar\, e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{2}$$

para calcular a dependência angular de $Y_{4m}(\theta,\varphi)$ sem se preocupar com a normalização. Parta de $Y_{44}(\theta,\varphi) = A\, e^{i4\varphi}\,\sin^4\theta$.

$*$ **7.10** *Gasiorowicz 7.11*

Uma partícula num potencial esfericamente simétrico está num estado descrito pela função de onda

$$\psi(x,y,z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^2} \tag{3}$$

Qual é a probabilidade que uma medida de L^2 dê zero? Qual é a probabilidade que dê $6\hbar^2$? Se o valor de l for $l = 2$, quais são as probabilidades relativas para $m = 2, 1, 0, -1, -2$?

$*$ **7.11** *Adaptado de Griffiths 4.19 (Ver também Gasiorowicz 7.8)*

Considere um potencial esfericamente simétrico, isto é, $V = V(r)$, onde $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ é a distância à origem. Mostre que

$$[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = [H, L^2] = 0$$

onde

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r), \quad \text{com} \quad p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

É portanto possível ter funções próprias simultâneas de H, L^2 e L_z.

$*$ **7.12** *Adaptado de Griffiths 4.20*

a) Prove que para uma partícula num potencial arbitrário, $V(\vec{r})$, a taxa de variação do valor médio do momento angular é igual ao valor médio do momento da força, isto é,

$$\frac{d}{dt}\left\langle \vec{L}\right\rangle = \left\langle \vec{N}\right\rangle$$

onde

$$\vec{N} = \vec{r}\times(-\vec{\nabla}V)$$

b) Mostre que para qualquer potencial esfericamente simétrico, isto é, $V = V(r)$, então

$$\frac{d}{dt}\left\langle \vec{L}\right\rangle = 0$$

7.13 Na aula usámos a relação

$$\frac{i}{\hbar}\langle\theta,\varphi|\, L_z\, |l,m\rangle = \frac{\partial}{\partial\varphi}\langle\theta,\varphi|l,m\rangle \tag{4}$$

Esta relação pode parecer um pouco estranha embora seja semelhante a uma que demonstrámos no capítulo 6, para o oscilador harmónico

$$\langle x|\, p_{\text{op}}\, |0\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle$$

Para compreender esta relação vamos ver uma série de questões que nos vão permitir compreender melhor a relação entre o momento angular e as rotações no espaço a três dimensões.

a) Mostre que se rodar um vetor $\vec{r}$ em $\mathbb{R}^3$ dum ângulo infinitesimal α em torno duma direção definida pelo vetor unitário $\hat{\vec{\alpha}}$, obtemos um novo vetor dado por

$$\vec{r'} = \vec{r} + \alpha\hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r} = \vec{r} + \vec{\alpha} \times \vec{r} \tag{5}$$

onde se definiu $\vec{\alpha} = \alpha\hat{\vec{\alpha}}$, $|\vec{\alpha}| = \alpha$. Se tiver dificuldade em compreender esta relação veja o caso particular de rotações à volta dos eixos do referencial, por exemplo, para uma rotação infinitesimal em torno do eixo dos z,

$$x' = x - \alpha y, \quad y' = y + \alpha x, \quad z' = z$$

b) Mostre que

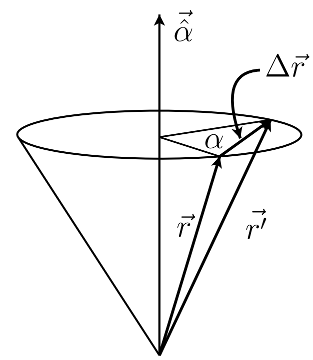
$$\frac{i}{\hbar}\left[\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r}\right] = \vec{\alpha} \times \vec{r}$$

onde $\vec{L}$ é o operador momento angular, e portanto, para rotações infinitesimais,

$$\vec{r'} = \vec{r} + \frac{i}{\hbar}\left[\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r}\right] \tag{6}$$

c) Vamos agora generalizar Eq. (5) para rotações finitas. Mostre que se rodar o vetor $\vec{r}$ dum ângulo finito, α, como indicado na Figura junta, se obtém,

$$\begin{aligned}\vec{r'} &= \vec{r} + \Delta\vec{r}\\ &= \vec{r} + \sin\alpha\ \hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r} + (1 - \cos\alpha)\ \hat{\vec{\alpha}} \times \left(\hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r}\right)\end{aligned} \tag{7}$$



Se tiver dificuldade em compreender a Eq. (7), veja casos particulares de rotações finitas em torno dos eixos coordenados. Por exemplo, para uma rotação em torno dos eixos dos z dum ângulo α temos,

$$x' = x\cos\alpha - y\sin\alpha, \quad y' = x\sin\alpha + y\cos\alpha, \quad z' = z$$

d) Vamos agora generalizar a Eq. (6) para transformações finitas. Mostre que a expressão correta é

$$\vec{r'} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}\ \vec{r}\ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} \tag{8}$$

Esta expressão indica que o resultado para transformações finitas se obtém do resultado infinitesimal simplesmente exponenciando este último. Este resultado é conhecido da matemática para os grupos de transformações contínuas, designados por *grupos de Lie*, de que as rotações em $\mathbb{R}^3$ são um exemplo. Para mostrar que a Eq. (8) é equivalente à Eq. (7) terá de seguir os passos seguintes:

- Usar o *Lemma de Baker-Hausdorff* (ver problema 5.8, Gasiorowicz 5.12) para escrever:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}\ \vec{r}\ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} = \vec{r} + \frac{i}{\hbar}\left[\vec{\alpha}\cdot\vec{L},\vec{r}\right] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\left[\vec{\alpha}\cdot\vec{L},\left[\vec{\alpha}\cdot\vec{L},\vec{r}\right]\right] + \cdots$$

- Mostrar que:

$$\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{L},\vec{r}\right] = \hat{\vec{\alpha}}\times\vec{r}$$

$$\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{L},\hat{\vec{\alpha}}\times\vec{r}\right] = \hat{\vec{\alpha}}\times\left(\hat{\vec{\alpha}}\times\vec{r}\right)$$

$$\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{L},\hat{\vec{\alpha}}\times\left(\hat{\vec{\alpha}}\times\vec{r}\right)\right] = -\hat{\vec{\alpha}}\times\vec{r}$$

  Para obter estes resultados é muito conveniente usar a seguinte notação para o produto externo

$$\vec{A}\times\vec{B} = \epsilon_{ijk}A_jB_k\ \vec{e}_i$$

  onde a soma sobre índices repetidos está implícita (convenção de Einstein) e ϵ_{ijk} é o tensor completamente anti-simétrico de Levi-Civita definido por

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{se } \{i,j,k\} \text{ for permutação par de } \{1,2,3\} \\ -1 & \text{se } \{i,j,k\} \text{ for permutação ímpar de } \{1,2,3\} \\ 0 & \text{se } i=j,\ j=k,\ \text{ou } i=k,\ \text{isto é, dois índices iguais.} \end{cases}$$

- Reagrupar os termos para obter as séries de $\sin\alpha$ e $\cos\alpha$.

e) Nas alíneas anteriores vimos que existe uma relação entre rotações em $\mathbb{R}^3$ e o operador do momento angular. Vamos agora ver quais as implicações para os estados em mecânica quântica. Seja o estado $|\vec{r}_0\rangle$ o estado próprio do operador $\vec{r}_{\rm op}$ com valor próprio $\vec{r}_0$, isto é,

$$\vec{r}_{\rm op}\,|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0\,|\vec{r}_0\rangle$$

Como o operador $\vec{r}_{\rm op}$ é hermítico também devemos ter

$$\langle\vec{r}_0|\,\vec{r}_{\rm op} = \vec{r}_0\,\langle\vec{r}_0|$$

Apliquemos agora Eq. (8) ao $\langle\vec{r}_0|$. Obtemos

$$\langle\vec{r}_0|\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}\ \vec{r}_{\rm op}\ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} = \langle\vec{r}_0|\,\vec{r'}_{\rm op} = \vec{r'}_0\,\langle\vec{r}_0|$$

onde $\vec{r'}_0$ é o resultado de rodar $\vec{r}_0$ por um ângulo α em torno de $\hat{\vec{\alpha}}$. Multiplicando à direita por $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}$ obtemos

$$\langle\vec{r}_0|\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}\ \vec{r}_{\rm op} = \vec{r'}_0\,\langle\vec{r}_0|\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}$$

o que nos diz que $\langle\vec{r}_0|\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}}$ é um estado próprio de $\vec{r}_{\rm op}$ com valor próprio $\vec{r'}_0$. Podemos portanto escrever

$$\langle\vec{r}_0|\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} = \left\langle\vec{r'}_0\right|$$

o que mostra que $\vec{L}$ é o gerador das rotações em $\mathbb{R}^3$. Para transformações infinitesimais esta equação reduz-se a

$$\langle \vec{r}_0 | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{L} \right) = \langle \vec{r}_0 + \vec{\alpha} \times \vec{r}_0 | \tag{9}$$

f) Estamos agora em posição de demonstrar a Eq. (4). Para isso consideremos uma rotação infinitesimal em torno do eixo dos z por um ângulo α. Em coordenadas esféricas isso corresponde a

$$r' = r, \quad \theta' = \theta, \quad \varphi' = \varphi + \alpha$$

pelo que podemos escrever para a Eq. (9)

$$\langle r, \theta, \varphi | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) = \langle r, \theta, \varphi + \alpha | = \langle r, \theta, \varphi | + \alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi |$$

onde fizemos um desenvolvimento em série retendo somente os termos em primeira ordem em α, o que é correto para as transformações infinitesimais que estamos a considerar. Igualando termo a termo, obtemos finalmente a Eq. (4),

$$\frac{i}{\hbar} \langle \theta, \varphi | L_z | l, m \rangle = \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

como o coeficiente do termo linear em α.

g) O mesmo tipo de argumento pode ser usado para obter

$$\langle \theta, \varphi | L_{\pm} | l, m \rangle = \hbar \, e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

e

$$\langle \theta, \varphi | L^2 | l, m \rangle = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

h) Use estas técnicas para mostrar que

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} \, \vec{r}_{\rm op} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} = \vec{r}_{\rm op} + \vec{a}$$

onde $\vec{a}$ é um vetor constante, e que portanto

$$\langle \vec{r} | \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} = \langle \vec{r} + \vec{a} |$$

o que mostra que $\vec{p}$ é o gerador das translações (ver problema 6.9).

i) Use os resultados da alínea h) para mostrar que de facto se tem para os estados do oscilador harmónico (a uma dimensão)

$$\langle x | p_{\rm op} | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \langle x | n \rangle$$