

Mecânica Quântica – Série 7

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

(Versão de 12 de Novembro de 2014)

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 polinômios 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

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

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

7.3 Os polinômios associados de Legendre podem ser obtidos a partir dos polinômios 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 polinômios $P_l^m(x)$ 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 Gasirowicz. Há um fator $(-1)^m$, designado por fase de *Condon-Shortley*, que eu incluo nos polinômios associados de Legendre e o Gasirowicz inclui na definição das harmônicas esféricas. Assim a minha definição de harmônicas 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 Gasirowicz. 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.

- Escreva o Hamiltoniano que descreve o sistema
- Qual é o espectro de energia?
- 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

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

- Quais são os valores próprios de H ?
- Faça um esquema do espectro admitindo que $I_1 > I_3$
- Qual é o espectro no limite $I_1 \gg I_3$?

7.9 Gasirowicz 7.6

Use os operadores de descida,

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

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 Gasirowicz 7.11

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

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

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 Gasirowicz 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,

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

onde

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

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

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

7.13 Na aula usámos a relação

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

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 $\vec{\alpha}$, obtemos um novo vetor dado por

$$\vec{r}' = \vec{r} + \alpha \vec{\alpha} \times \vec{r} = \vec{r} + \vec{\alpha} \times \vec{r} \quad (5)$$

onde se definiu $\vec{\alpha} = \alpha \hat{\alpha}$, $|\vec{\alpha}| = \alpha$. 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

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

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

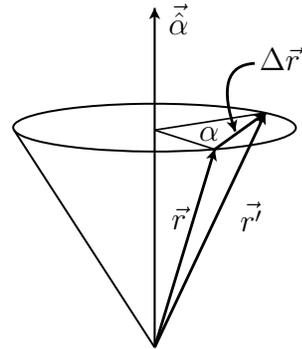
$$\vec{r}' = \vec{r} + \frac{i}{\hbar} [\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r}] \quad (6)$$

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,

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

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

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

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:

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

- Mostrar que:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\vec{\alpha}\cdot\vec{L}, \vec{r}] &= \vec{\alpha} \times \vec{r} \\ \frac{i}{\hbar} [\vec{\alpha}\cdot\vec{L}, \vec{\alpha} \times \vec{r}] &= \vec{\alpha} \times (\vec{\alpha} \times \vec{r}) \\ \frac{i}{\hbar} [\vec{\alpha}\cdot\vec{L}, \vec{\alpha} \times (\vec{\alpha} \times \vec{r})] &= -\vec{\alpha} \times \vec{r} \end{aligned}$$

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

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

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}_{op} com valor próprio \vec{r}_0 , isto é,

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

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

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

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

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

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

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

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}_{op} com valor próprio \vec{r}'_0 . Podemos portanto escrever

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

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

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

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

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}} \vec{r}_{\text{op}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}} = \vec{r}_{\text{op}} + \vec{\alpha}$$

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

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

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)

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