

# Mecânica Quântica – Série 7

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2007/2008

(Versão de 24 de Outubro de 2007)

**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

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

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

**7.3** Os 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 exactamente a mesma do Gasiorowicz. Há um factor  $(-1)^m$ , 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[1, 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*

**7.6** *Gasiorowicz 7.3*

**7.7** *Gasiorowicz 7.4*

**7.8** *Gasiorowicz 7.5*

**7.9** *Gasiorowicz 7.6*

**7.10** *Gasiorowicz 7.11*

**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,

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

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

$$\frac{i}{\hbar} \langle \theta, \varphi | L_z | l, m \rangle = \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \quad (1)$$

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 vector  $\vec{r}$  em  $\mathbb{R}^3$  dum ângulo infinitesimal  $\alpha$  em torno duma direcção definida pelo vector unitário  $\vec{\alpha}$ , obtemos um novo vector dado por

$$\vec{r}' = \vec{r} + \alpha \vec{\alpha} \times \vec{r} = \vec{r} + \vec{\alpha} \times \vec{r} \quad (2)$$

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

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

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

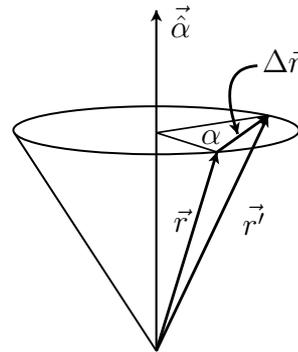
$$\vec{r}' = \vec{r} + \frac{i}{\hbar} [\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r}] \quad (3)$$

c) Vamos agora generalizar Eq. (2) para rotações finitas. Mostre que se rodar o vector  $\vec{r}$  dum ângulo finito,  $\alpha$ , como indicado na Figura junta, se obtém,

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= \vec{r} + \Delta \vec{r} \\ &= \vec{r} + \sin \alpha \vec{\alpha} \times \vec{r} + (1 - \cos \alpha) \vec{\alpha} \times (\vec{\alpha} \times \vec{r}) \quad (4) \end{aligned}$$

Se tiver dificuldade em compreender a Eq. (4), veja casos particulares de rotações finitas em torno dos eixos coordenados. Por exemplo, para uma rotação em torno dos eixos dos  $z$  dum ângulo  $\alpha$  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. (3) para transformações finitas. Mostre que a expressão correcta é

$$\vec{r}' = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{L}} \vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{L}} \quad (5)$$

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. (5) é equivalente à Eq. (4) 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  $\epsilon_{ijk}$  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  $\vec{r}_{\text{op}}$  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  $\vec{r}_{\text{op}}$  é hermitico também devemos ter

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

Apliquemos agora Eq. (5) 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  $\alpha$  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  $\vec{r}_{\text{op}}$  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

$$\langle \vec{r}_0 | \left( 1 + \frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{L} \right) = \langle \vec{r}_0 + \vec{\alpha} \times \vec{r}_0 | \quad (6)$$

f) Estamos agora em posição de demonstrar a Eq. (1). Para isso consideremos uma rotação infinitesimal em torno do eixo dos  $z$  por um ângulo  $\alpha$ . Em coordenadas esféricas isso corresponde a

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

pelo que podemos escrever para a Eq. (6)

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

onde fizemos um desenvolvimento em série retendo somente os termos em primeira ordem em  $\alpha$ , o que é correcto para as transformações infinitesimais que estamos a considerar. Igualando termo a termo, obtemos finalmente a Eq. (1),

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

como o coeficiente do termo linear em  $\alpha$ .

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

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

onde  $\vec{a}$  é um vector 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)

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