Mecânica Quântica – Série 7

Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

(Versão de 31 de Outubro de 2008)

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 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[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*

∗**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,

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

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

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

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 α em torno duma direcção definida pelo vector unitário $\hat{\vec{\alpha}}$, obtemos um novo vector dado por

$$\vec{r'} = \vec{r} + \alpha \hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r} = \vec{r} + \vec{\alpha} \times \vec{r} \tag{2}$$

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

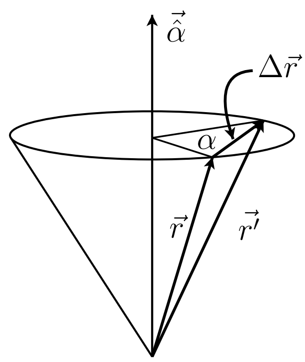
$$\frac{i}{\hbar} \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r} \right] = \vec{\alpha} \times \vec{r}$$

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

$$\vec{r'} = \vec{r} + \frac{i}{\hbar} \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{L}, \vec{r} \right] \tag{3}$$

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

$$\begin{aligned} \vec{r'} &= \vec{r} + \Delta \vec{r} \\ &= \vec{r} + \sin\alpha \; \hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r} + (1 - \cos\alpha) \; \hat{\vec{\alpha}} \times \left(\hat{\vec{\alpha}} \times \vec{r} \right) \end{aligned} \tag{4}$$



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 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. (3) para transformações finitas. Mostre que a expressão correcta é

$$\vec{r'} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} \; \vec{r} \; e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{L}} \tag{5}$$

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:

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

- Mostrar que:

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

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

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

  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 $\vec{r}_{\text{op}}$ 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 hermítico 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 α em torno de $\vec{\hat{\alpha}}$. 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

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

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

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

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 α. 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 α, 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 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 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)

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