MOMENTO ANGULAR EM MECÂNICA QUÂNTICA

Consideremos uma partícula em 3 dimensões, sendo q_1, q_2, q_3 os operadores de posição e p_1, p_2, p_3 os operadores de momento:

$$[p_k,\, q_\ell] \;=\; \frac{\hbar}{i}\,\delta_{k\ell} \quad , \qquad k, \ell = 1, 2, 3 \quad . \tag{1}$$

O vetor de momento angular, classicamente definido por $\vec{L} = \vec{q} \times \vec{p}$ tem como componentes

$$L_3 \;=\; q_1\, p_2 - q_2\, p_1 \quad , \quad L_2 \;=\; q_3\, p_1 - q_1\, p_3 \quad , \quad L_1 \;=\; q_2\, p_3 - q_3\, p_2 \quad . \tag{2}$$

(Note que não há nenhuma ambiguidade com relação à ordem dos diversos fatores pois só aparecem termos da forma $q_k\, p_\ell$ com $k \neq \ell$).

Os operadores L_1, L_2 e L_3 satisfazem às relações de comutação:

$$\left[\vec{L}^1,\, L_2\right] \;=\; i\hbar L_3 \quad , \quad \left[\vec{L}^2,\, L_3\right] \;=\; i\hbar L_1 \quad , \quad \left[\vec{L}^3,\, L_1\right] \;=\; i\hbar L_2 \tag{3}$$

como conseqüência de (1).

É interessante novamente comparar com os colchetes de Poisson na Mecânica Clássica:

$$\left\{\vec{L}^1,\, L_2\right\} \;=\; L_3 \quad , \quad \left\{\vec{L}^2,\, L_3\right\} \;=\; L_1 \quad , \quad \left\{\vec{L}^3,\, L_1\right\} \;=\; L_2 \tag{4}$$

que são conseqüências de $\{q_k,\, p_\ell\} = 1$.

As relações de comutação entre os L_i's $i = 1, 2, 3$ tem conseqüências notáveis para as propriedades do momento angular em Mecânica Quântica, que passamos a analisar.

Notemos inicialmente que os operadores L_1, L_2 e L_3 são hermiteanos (por que?) e portanto são observáveis.

Introduzimos agora o operador

$$\vec{L}^2 \;=\; L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \quad , \tag{5}$$

o módulo ao quadrado do vetor (operador) $\vec{L}$!

O operador $\vec{L}^2$ também é hermiteano (por que?) e comuta com todos os L_j, $j = 1, 2, 3$:

$$\left[\vec{L}^2, L_1\right] \;=\; \left[\vec{L}^2, L_2\right] \;=\; \left[\vec{L}^2, L_3\right] \;=\; 0 \quad , \tag{6}$$

o que já se sugeria pelo colchete de Poisson $\left\{\vec{L}^2 , L_j\right\} = 0$, $j = 1, 2, 3$.

Observação Importante

As relações de comutação (3) e (6) já foram encontradas por nós no contexto dos sistemas de 2 níveis. De fato definindo: $S_1 = \dfrac{\hbar}{2}\,\sigma_1$, $S_2 = \dfrac{\hbar}{2}\,\sigma_2$, $S_3 = \dfrac{\hbar}{2}\,\sigma_3$, onde σ_1, σ_2 e σ_3 são as matrizes de Pauli, temos $[S_1, S_2] = i\hbar S_3$ e permutações cíclicas. O operador $\vec{S} = \dfrac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$, satisfaz

$$\vec{S}^2 \;=\; \frac{\hbar^2}{4}\left[\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2\right] \;=\; \frac{3\hbar^2}{4} \;=\; \hbar^2\,\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)$$

(lembre-se que $\sigma_j^2 = 1$, $j = 1, 2, 3$).

Consideremos agora o problema da determinação e propriedades dos autovalores e autovetores de $\vec{L}^2$. Se φ_λ é um autovetor, com autovalor λ:

$$\vec{L}^2\,\varphi_\lambda \;=\; \lambda\,\varphi_\lambda \tag{7}$$

então $L_1\,\varphi_\lambda$, $L_2\,\varphi_\lambda$ e $L_3\,\varphi_\lambda$ também são autovetores de $\vec{L}^2$ com o mesmo autovalor λ! Isto é conseqüência da relação de comutação (6):

$$\vec{L}^2\,(L_j\,\varphi_\lambda) \;=\; L_j\,\vec{L}^2\,\varphi_\lambda \;=\; \lambda\,(L_j\,\varphi_\lambda) \qquad j = 1, 2, 3 \quad . \tag{8}$$

A relação (8) implica na degenerescência de λ, se $\lambda \neq 0$. De fato se λ for não degenerado então, de (8) concluimos que

$$L_j\,\varphi_\lambda \;=\; \alpha_j\,\varphi_\lambda \qquad , \qquad j = 1, 2, 3$$

onde α_1, α_2, α_3 são números (reais!) i.e. φ_λ é autovetor simultâneo de L_1, L_2 e L_3. Isto implica em $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0$! (Por que?)

Portanto

$$\vec{L}^2\,\varphi_\lambda \;=\; L_1^2\,\varphi_\lambda + L_2^2\,\varphi_\lambda + L_3^2\,\varphi_\lambda \;=\; \left(\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2\right)\,\varphi_\lambda \;=\; 0$$

i.e. $\lambda = 0$.

Determinemos agora a dimensão do subespaço:

$$\mathcal{H} \;=\; \left\{\varphi_\lambda \,:\, \vec{L}^2\,\varphi_\lambda = \lambda\,\varphi_\lambda\right\} \quad . \tag{9}$$

A relação (8) tem como conseqüência, se $\varphi_\lambda \in \mathcal{H}_\lambda$ então $L_1\,\varphi_\lambda$, $L_2\,\varphi_\lambda$ e $L_3\,\varphi_\lambda$ também estão em $\mathcal{H}_\lambda$.

Podemos portanto considerar o problema de achar os autovetores de L_3 em $\mathcal{H}_\lambda$, i.e. procuramos vetores $\varphi_{\lambda,m}$ satisfazendo

$$\vec{L}^2\,\varphi_{\lambda,m} \;=\; \lambda\,\varphi_{\lambda,m} \tag{10a}$$

$$L_3\,\varphi_{\lambda,m} \;=\; \hbar m\,\varphi_{\lambda,m} \tag{10b}$$

ou seja $\varphi_{\lambda,m}$ é um autovetor simultaneamente de $\vec{L}^2$ e L_3, com autovalor λ e $\hbar m$ respectivamente.

Vamos introduzir agora os operadores

$$L_+ \;=\; L_1 \,+\, i\,L_2 \tag{11a}$$

$$L_- \;=\; L_1 \,-\, i\,L_2 \tag{11b}$$

que desempenharão com relação ao operador L_3 o mesmo papel dos operadores a^* e a com relação ao operador $N = a^*a$ como discutido no oscilador harmônico. Isso se vê através das relações de comutação:

$$[L_3,\,L_+] \;=\; \hbar\,L_+ \tag{12a}$$

$$[L_3,\,L_-] \;=\; -\hbar\,L_- \tag{12b}$$

(Compare com $[N,a^*] = a^*$, $[N,a] = -a$).

Como conseqüência de (12) temos

$$L_3\,(L_+\,\varphi_{\lambda,m}) \;=\; \hbar(m+1)\,(L_+\,\varphi_{\lambda,m}) \tag{13a}$$

$$L_3\,(L_-\,\varphi_{\lambda,m}) \;=\; \hbar(m-1)\,(L_-\,\varphi_{\lambda,m}) \tag{13b}$$

de onde concluimos que se $L_+\,\varphi_{\lambda,m} \neq 0$ então ele continua autovetor de $\vec{L}^2$ com autovalor λ, e continua também autovetor de L_3 mas com autovalor $\hbar(m+1)$! Analogamente, se $L_-\,\varphi_{\lambda,m} \neq 0$ então é autovetor de $\vec{L}^2$ com autovalor λ e de L_3 com autovalor $\hbar(m-1)$!

Os operadores $L_\pm$ satisfazem também

$$\begin{aligned} L_+\,L_- &= L_1^2 + L_2^2 + \hbar L_3 = \vec{L}^2 - L_3^2 + \hbar L_3 \\ L_-\,L_+ &= L_1^2 + L_2^2 - \hbar L_3 = \vec{L}^2 - L_3^2 - \hbar L_3 \end{aligned} \tag{14}$$

Note que os operadores L_+ e L_- não são hermiteanos

$$\langle L_+\,\psi|\phi\rangle \;=\; \langle\psi|L_-\,\phi\rangle \quad , \qquad \text{i.e.} \quad (L_+)^* = L_- \quad .$$

Restrições a λ e am

a) Tomemos $\varphi_{\lambda,m}$ normalizado, $\langle\varphi_{\lambda,m}|\varphi_{\lambda,m}\rangle = 1$ então

$$\begin{aligned} \lambda \;&=\; \left\langle\varphi_{\lambda,m}|\vec{L}^2\,\varphi_{\lambda,m}\right\rangle \;=\; \langle L_1\,\varphi_{\lambda,m}|L_1\,\varphi_{\lambda,m}\rangle + \\ &+\; \langle L_2\,\varphi_{\lambda,m}|L_2\,\varphi_{\lambda,m}\rangle + \langle L_3\,\varphi_{\lambda,m}|L_3\,\varphi_{\lambda,m}\rangle \quad . \end{aligned}$$

Portanto, $\lambda \geq 0$ (como soma de 3 números não negativos).

b) Das relações (14) seguem:

$$0 \;\leq\; \langle L_-\,\varphi_{\lambda,m}|L_-\,\varphi_{\lambda,m}\rangle \;=\; \lambda - \hbar^2 m^2 + \hbar^2 m \tag{15a}$$

e

$$0 \;\leq\; \langle L_+\,\varphi_{\lambda,m}|L_+\,\varphi_{\lambda,m}\rangle \;=\; \lambda - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m \tag{15b}$$

Como $\lambda \geq 0$ podemos escrever

$$\lambda = \hbar^2 \ell(\ell+1) \tag{16}$$

com $\ell \geq 0$ univocamente determinado.

De (15a) e (15b) tiramos então:

$$\hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - m(m-1)\right] \geq 0 \tag{17a}$$

$$\hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - m(m+1)\right] \geq 0 \tag{17b}$$

As relações (17a) e (17b) são equivalentes a

$$|m| \leq \ell \tag{18}$$

Passaremos a indexar $\varphi_{\lambda,m}$ por ℓ e m, i.e. $\varphi_{\ell,m}$ com

$$\vec{L}^2 \varphi_{\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \varphi_{\ell,m} \tag{19}$$

$$\vec{L}_3 \varphi_{\ell,m} = \hbar m \varphi_{\ell,m} \tag{20}$$

com as restrições $\ell \geq 0$, $|m| \leq \ell$.

Incidentalmente, tomando $\langle \varphi_{\ell,m} | \varphi_{\ell,m} \rangle = 1$ as fórmulas (15a) e (15b) fornecem

$$\langle L_+ \varphi_{\ell,m} | L_+ \varphi_{\ell,m} \rangle = \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - m(m+1)\right] \tag{21a}$$

$$\langle L_- \varphi_{\ell,m} | L_- \varphi_{\ell,m} \rangle = \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - m(m-1)\right] \tag{21b}$$

Em particular $L_+ \varphi_{\ell,m} = 0$ se e somente se $m = \ell$; e $L_- \varphi_{\ell,m} = 0$ se e somente se $m = -\ell$. Portanto

$$L_+ \varphi_{\ell,m} = \hbar \left[\ell(\ell+1) - m(m+1)\right]^{1/2} \varphi_{\ell,m+1} \quad \text{se} \quad m < \ell \tag{22a}$$

$$L_- \varphi_{\ell,m} = \hbar \left[\ell(\ell+1) - m(m-1)\right]^{1/2} \varphi_{\ell,m-1} \quad \text{se} \quad m > -\ell \tag{22b}$$

$$L_+ \varphi_{\ell,\ell} = 0 \qquad \text{e} \qquad L_- \varphi_{\ell,-\ell} = 0 \tag{23}$$

Portanto considerações análogas às que levaram à determinação dos autovalores de $N = a^* a$ nos levam, para evitar a violação de (18) por aplicação sucessiva de L_+ que os autovalores de L_3 devem ser $\hbar\ell$, $\hbar(\ell-1)$, $\hbar(\ell-2)$, $\ldots$. Analogamente para evitar a violação de (18) por aplicação sucessiva de L_- os mesmos autovalores deverão ser: $-\hbar\ell$, $\hbar(-\ell+1)$, $\hbar(-\ell+2)$, $\ldots$. Portanto a única possibilidade é ℓ ser inteiro ou semi-inteiro e $m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell$. Basta portanto conhecer o vetor $\varphi_{\ell,\ell}$, caracterizado por

$$\vec{L}^2 \varphi_{\ell,\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1)\, \varphi_{\ell,\ell} \tag{24a}$$

$$L_+ \varphi_{\ell,\ell} = 0 \tag{24b}$$

para construir $\varphi_{\ell,\ell-1}$ através de

$$\varphi_{\ell,\ell-1} = \frac{1}{\hbar\left[\ell(\ell+1) - \ell(\ell-1)\right]^{1/2}}\, \varphi_{\ell,\ell} \tag{25a}$$

$$\varphi_{\ell,\ell-2} = \frac{1}{\hbar\left[\ell(\ell+1) - \ell(\ell-1)(\ell-2)\right]^{1/2}}\, L_- \varphi_{\ell,\ell-1} \tag{25b}$$

etc..

As autofunções do momento angular — Harmônicos esféricos

1) Para a construção das autofunções do momento angular começaremos por expressar os operadores L_1, L_2 e L_3 em coordenadas esféricas.

Dada uma função $g(x, y, z)$ ela se expressa em coordenadas esféricas através de

$$f(r, \theta, \varphi) \; = \; g(r \operatorname{sen} \theta \, \cos \varphi, \, r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi, \, r \, \cos \theta)$$

A regra da derivação em cadeia nos dá:

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} \; = \; x \, \frac{\partial g}{\partial y} \; - \; y \, \frac{\partial g}{\partial x} \tag{1}$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} \; = \; \operatorname{cotg} \theta \left(x \, \frac{\partial g}{\partial x} \; + \; y \, \frac{\partial g}{\partial y} \right) \; - \; \tan \theta \, z \, \frac{\partial g}{\partial z} \tag{2}$$

Ora

$$\begin{aligned}
L_+ \; = \; L_1 + i \, L^2 \; &= \; \frac{\hbar}{i} \left(y \, \frac{\partial}{\partial z} \; - \; z \, \frac{\partial}{\partial y} \; + \; i \, z \, \frac{\partial}{\partial x} \; - \; i \, x \, \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
&= \; \frac{\hbar}{c} \, (y - i x) \, \frac{\partial}{\partial z} + \hbar z \left(\frac{\partial}{\partial x} \; + \; i \, \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
&= \; - \hbar (x + i y) \, \frac{\partial}{\partial z} \; - \; \hbar z \left(\frac{\partial}{\partial x} \; + \; i \, \frac{\partial}{\partial x_2} \right)
\end{aligned}$$

Ora

$$z \; = \; r \, \cos \theta \; = \; e^{i \varphi} \operatorname{cotg} \theta (x - i y) \; = \; e^{-i \varphi} \operatorname{cotg} \theta (x + i y)$$

e portanto

$$\begin{aligned}
L_+ \; &= \; \hbar \, e^{i \varphi} \left[\operatorname{cotg} \theta (x - i y) \left(\frac{\partial}{\partial x} \; + \; i \, \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \; - \; \hbar \; e^{i \varphi} \operatorname{tg} \theta \, z \, \frac{\partial}{\partial z} \\
&= \; \hbar \, e^{i \varphi} \operatorname{cotg} \theta \left(x \, \frac{\partial}{\partial x} \; + \; y \, \frac{\partial}{\partial y} \right) \; - \; \hbar \; e^{i \varphi} \, \tan \theta \, z \, \frac{\partial}{\partial z} \\
&\quad + \hbar \, e^{i \varphi} \, i \, \left(x \, \frac{\partial}{\partial y} \; + \; y \, \frac{\partial}{\partial x} \right) \operatorname{cotg} \theta
\end{aligned}$$

Comparando (1) e (2) vemos

$$L_+ \;=\; \hbar\, e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{cotg}\theta \, \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \tag{3}$$

Analogamente ou diretamente de $(L_+)^* = L_{--}$ obtemos

$$L_- \;=\; \hbar\, e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{cotg}\theta \, \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \tag{4}$$

De (1) tiramos também

$$L_3 \;=\; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{5}$$

2) Chamando de $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ as autofunções de $\vec{L}^2$ e L_3:

$$\vec{L}^2\, Y_{\ell,m} \;=\; \hbar^2 \ell(\ell+1)\, Y_{\ell,m} \tag{5a}$$

$$L_3\, Y_{\ell,m} \;=\; \hbar m\, Y_{\ell,m} \tag{5b}$$

podemos determiná-las através das equações diferenciais correspondentes.

A dependência na variável φ pode ser facilmente obtida a partir de (5b):

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\, Y_{\ell,m}}{\partial\varphi} \;=\; \hbar m\, Y_{\ell,m} \tag{6}$$

de onde concluímos que

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \;=\; g_{\ell,m}(\theta)\, e^{im\varphi} \tag{7}$$

onde $g_{\ell,m}$ é uma função de θ que poderia ser determinada a partir de (5a). Uma conseqüência importante de (7) e do fato de que $Y_{\ell,m}(theta, \varphi + 2\pi) = Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ (i.e. da periodicidade na variável angular φ_i note $x = r\, \cos\varphi \operatorname{sen}\theta$ e $y = r \operatorname{sen}\varphi \operatorname{sen}\theta$ são funções periódicas de φ!) é que

$$e^{im2\pi} \;=\; 1 \qquad i.e. \qquad m \quad \text{inteiro!}$$

Note que as relações de comutação entre os L_j's impunha que $\ell \geq 0$, $|m| \leq \ell$ fossem números em inteiros ou *semi-inteiros.* Essa última possibilidade está assim excluída para os $Y_{\ell,m}$!

Em lugar de resolver (5a) para determinar $Y_{\ell,m}$, usaremos os fatos:

$$
\begin{aligned}
L_+ Y_{\ell,\ell} &= 0 && (8) \\
L_- Y_{\ell,m} &= \hbar \left[\ell(\ell+1) - m(m-1)\right]^{1/2} Y_{\ell,m-1} && (9)
\end{aligned}
$$

onde supomos

$$
\langle Y_{\ell,m} | Y_{\ell,m'} \rangle = \delta_{mm'} \tag{10}
$$

Como $Y_{\ell,m}$ é uma função apenas das variáveis θ e φ (não depende de r!) a condição de normalização (10) deve ser entendida.

$$
\int Y^*_{\ell,m'}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)\, d\Omega = \delta_{mm'} \tag{10$'$}
$$

com $d\Omega \equiv \operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\varphi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Substituindo (7) em (8) obtemos (usando (3))

$$
g'_{\ell\ell}(\theta) - \ell \operatorname{cotg}\theta \, g_{\ell\ell}(\theta) = 0 \tag{11}
$$

(A equação (8) é análoga à equação $a\varphi_0 = 0$ usado para a determinação do estado fundamental do oscilador harmônico. Lá como cá, transforma-se por considerações algébricas, i.e. que envolvem apenas as relações de comutação, uma equação de segunda ordem numa equação simples de primeira ordem. A equação $\dfrac{\hbar}{\sqrt{2m}}\,\varphi'_0(x) + \sqrt{\dfrac{m}{2}}\,\omega\varphi_0(x) = 0$ lá, equivale à equação (11) aqui!)

A equação (11) pode ser resolvida imediatamente:

$$
g_{\ell\ell}(\theta) = C_\ell (\operatorname{sen}\theta)^\ell \tag{12}
$$

onde a constante C_ℓ é determinada a menos de um fator de fase pela condição de normalização (10$'$). Nossa escolha de fase junto com a condição de normalização nos dá:

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \;=\; (-1)^m \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \, \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta)\; e^{im\varphi} \tag{13}$$

com

$$P_\ell^m(u) \;=\; (-1)^{\ell+m} \, \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \, \frac{(1-u^2)^{-m/2}}{2^\ell\, \ell!} \left(\frac{d}{du} \right)^{\ell-m} \left(1-u^2\right)^\ell \tag{14}$$

(Para $m < \ell$ determina-se $Y_{\ell,m}$ aplicando-se $(L_-)^{\ell-m}$ e usando-se (9)!).

NÍVEIS DE ENERGIA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Solução algébrica (W. Pauli, *Z. Phys.* **36**, 336 (1926); M. Bander and C. Itzykson, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 330 (1968))

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$\text{Campo Central} \Rightarrow [H, L_i] = \left[H, \vec{L}^2\right] = 0 \qquad i = 1, 2, 3 \tag{1}$$

O vetor de Lenz

$$\vec{A} = \frac{\vec{P}}{\mu} \times \vec{L} - Ze^2 \frac{\vec{r}}{r} \tag{2}$$

classicamente é uma grandeza conservada: $\{\vec{A}, H\} = 0$. (Verifique!)

Quanticamente o operador $\vec{A}$ não é hermiteano (por que?) mas o operador

$$\vec{M} = \frac{1}{2}\left(\vec{A}\,\vec{A}^*\right) = \frac{1}{2\mu}\left[\vec{P} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{P}\right] - Ze^2 \frac{\vec{r}}{r} \tag{3}$$

é hermiteano e satisfaz:

$$[H, M_i] = 0 \tag{4}$$

$$[M_j, M_k] = \frac{\hbar}{i}\,\varepsilon_{jk\ell}\,L_\ell \left(\frac{2}{\mu}\right) H \tag{5}$$

$$[L_j, M_k] = i\,\hbar\,\varepsilon_{jk\ell}\,M_\ell \tag{6}$$

$$\vec{L} \cdot \vec{M} = \vec{M} \cdot \vec{L} = 0 \tag{7}$$

$$\left(M^2 - k^2\right) = \left(\frac{2}{\mu}\right) H \left(L^2 + \hbar^2\right) \tag{8}$$

$$\left(k = Ze^2\right)$$

Consideremos o subespaço

$$\{\varphi \,:\, H\varphi \;=\; E\varphi\} \;=\; \mathcal{H}_E$$

associado ao autovalor $E < 0$ de H .

Nesse subespaço o operador

$$\widetilde{M}_i \;=\; \left(\frac{\mu}{-2E}\right)^{1/2} M_i \tag{9}$$

é tal que os operadores

$$\vec{J}_1 \;=\; \frac{\vec{L} + \widetilde{\vec{M}}}{2} \tag{10}$$

e

$$\vec{J}_2 \;=\; \frac{\vec{L} - \widetilde{\vec{M}}}{2} \tag{11}$$

satisfazem relações de momento angular e comutam entre si:

$$\begin{aligned}
[J_{1j},\, J_{2k}] \;&=\; 0 \\
[J_{1j},\, J_{1k}] \;&=\; i\,\hbar\,\varepsilon_{jk\ell}\,J_\ell \\
[J_{2j},\, J_{2k}] \;&=\; i\,\hbar\,\varepsilon_{jk\ell}\,J_{2\ell}
\end{aligned}$$

Portanto os autovalores de $\vec{J}_1^{\,2}$ são $\hbar^2 j_1(j_1+1)$, $j_1 \geq 0$ semi-inteiro ou inteiro e os autovalores de $\vec{J}_2^{\,2}$ são $\hbar^2 j_2(j_2+1)$ com $j_2 \geq 0$, semi-inteiro ou inteiro.

Devido a (7) $\vec{L}\cdot\widetilde{\vec{M}} = \vec{L}\cdot\widetilde{\vec{M}} = 0$ e portanto $\vec{J}_1^{\,2} = \left(\vec{L} - \widetilde{\vec{M}}^{\,2}\right)/4 = \left(\vec{L} + \widetilde{\vec{M}}^{\,2}\right)/4 = \vec{J}_2^{\,2}$ ou seja

$$j_1 \;=\; j_2 \;=\; j \tag{12}$$

Da equação (8) segue em $\mathcal{H}_E$ que

$$\frac{2E}{\mu}\left(\widetilde{\vec{M}}^{\,2} + \vec{L}^2 + \hbar^2\right) \;=\; -\,k^2 \tag{13}$$

Porém

$$\widetilde{\vec{M}}^2 + \vec{L}^2 + \hbar^2 \;=\; 4\left(\vec{J}_1^2\right) + \hbar^2 \qquad (\text{pois} \quad \vec{M}\cdot\vec{L} = 0)$$

$$\;=\; 4\left(\vec{J}_2^2\right) + \hbar^2 \;=\; \hbar^2\left(4j(j+1)+1\right)$$

Portanto

$$E \;=\; -\left(\frac{Ze^2}{\hbar}\right)\frac{1}{2\mu}\,\frac{1}{(2j+1)^2}$$

onde $2j+1$ que é um inteiro ≥ 0 é o número quântico principal!!

Exercícios

1. Verifique as relações de comutação

$$
\begin{aligned}
[L_1,\, L_2] &= i\hbar\, L_3 \quad , \quad \text{etc.} \\
\left[\vec{L}^2,\, L_1\right] &= \left[\vec{L}^2,\, L_2\right] = \left[\vec{L}^2,\, L_3\right] = 0 \\
\left[\vec{L}_3,\, L_\pm\right] &= \pm\hbar\, L_\pm \quad , \quad \left[\vec{L}_+,\, L_-\right] = \ldots \quad , \quad \text{etc.}
\end{aligned}
$$

2. Considere as matrizes de Pauli σ_1, σ_2, σ_3 e os operadores $S_1 = \dfrac{\hbar}{2}\sigma_1$, $S_2 = \dfrac{\hbar}{2}\sigma_2$, $S_3 = \dfrac{\hbar}{2}\sigma_3$. Mostre que S_1, S_2 e S_3 satisfazem as relações de comutação de momento angular. Se $\vec{S}^2 \equiv S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = \hbar^2 s(s+1)$, qual é o valor de s. Determine S_+, S_- e os autovetores de S_3 e a ação de $S_\pm$ nesses autovetores.

3. Considere as matrizes 3×3:

$$
L_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad , \quad L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

$L_- = (L_+)^*$. Se $L_\pm = L_1 \pm iL_2$, verifique as relações de comutação de momento angular para L_1, L_2 e L_3. Determine os autovetores de L_3 e a ação de $L_\pm$ nesses autovetores. Qual é o valor de ℓ?

4. Construa de maneira análoga à dos exercícios 2) e 3) acima, matrizes 5×5 que representem L_3, L_1, L_2, $L_\pm$ com suas relações de comutação de momento angular e com $\vec{L}^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$, $\ell = \dfrac{3}{2}$.

5. Uma partícula se encontra no estado $\psi(x, y, .z) = C(xz + yz + zx)\, e^{-\alpha r^2}$. Qual a probabilidade de que uma medida do momento angular total dê o valor zero? Qual a probabilidade de dar o valor $6\hbar^2$? Se o valor encontrado para ℓ for igual a 2, quais são as probabilidades relativas para $m = 2, 1, 0, -1, -2$?

6. Em 4 dimensões os operadores de momento angular são:

$$L_{jk} = q_j\, p_k - q_k\, p_j \qquad , \qquad j,k = 1,2,3,4 \quad j \neq k$$

Definindo

$$\vec{J} = (J_1,\, J_2,\, J_3) = (L_{23},\, L_{31},\, L_{12})$$

e

$$\vec{K} = (K_1,\, K_2,\, K_3) = (L_{14},\, L_{24},\, L_{34})$$

verifique que os operadores

$$\vec{J}^{+} = \vec{J} + \vec{K} \qquad \text{e} \qquad \vec{J}^{-} = \vec{J} - \vec{K}$$

comutam entre si e suas componentes obedecem às relações de momento angular (em 3 dimensões!). A partir disso determine os possíveis autovalores de $\vec{J}^{\pm\,2}$ $J_3^{\pm}$ e construa os multipletos de autoestados simultâneos de $\vec{J}^{+\,2}$ e $\vec{J}^{-\,2}$.

7. Mostre que se um sistema está em um autoestado de L_3 então o valor médio de L_1 e L_2 são nulos.

8. Se um sistema está em um autoestado $\varphi_{\ell m}$ de $\vec{L}^2$ e L_3, mostre que a menor incerteza em medidas de L_1 e L_2 se dá para $|m| = \ell$.

9. Verifique as relações de comutação:

   a) $[L_j,\, q_k] = i\,\hbar\, \varepsilon_{jk\ell}\, q_\ell$

   b) $[L_j,\, p_k] = i\,\hbar\, \varepsilon_{jk\ell}\, p_\ell \qquad\qquad j,k,\ell = 1,2,3$

   c) $\left[\vec{L},\, \vec{p}^{\,2}\right] = \left[\vec{L},\, \vec{r}^{\,2}\right] = 0$

   ($\varepsilon_{jk\ell} = 0$ se dois índices quaisquer forem iguais, $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{312} = \varepsilon_{231} = 1$, $\varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = -1$; ε_{ijk} é um tensor totalmente antisimétrico).

EXERCÍCIOS — POTENCIAIS CENTRAIS

1. Considere o estado fundamental do átomo de Hidrogênio $\psi(r,\theta,\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-r}$ e determine a densidade de probabilidade de o elétron ter momento $\vec{p}$.

2. Interpretando $-\,|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\, e$ como a densidade de carga da nuvem eletrônica de um elétron no átomo de hidrogênio, calcule o potencial eletrostático $\Phi(r)$ produzido pelo núcleo e pelo elétron no seu estado fundamental. Discuta a blindagem para $r \gg \frac{\hbar^2}{me^2}$ e o comportamento de $\Phi(r)$ quando $r \to 0$.

3. Mostre que para um potencial coulombiano

$$H \;=\; \frac{\vec{P}^2}{2\mu} \,-\, \frac{k}{r}$$

o operador de Lenz:

$$\vec{A} \;=\; \frac{1}{2\mu}\left[\vec{P}\times\vec{L} \,-\, \vec{L}\times\vec{P}\right] \,-\, k\,\frac{\vec{r}}{r}$$

satisfaz

$$\left[H,\vec{A}\right] \;=\; 0 \qquad \text{(i.e. } \vec{A} \text{ é uma constante do movimento!)}$$

(A existência dessa lei de conservação adicional é responsável pela chamada degenerescência acidental do átomo de hidrogênio).

4. Discuta a existência de um estado ligado com $\ell = 0$ no potencial "delta de casca":

$$V(r) \;=\; -\,\lambda\,\delta(r-a) \qquad ; \qquad \lambda > 0\,,\;\; a > 0 \quad .$$

5. Discuta a existência de um estado ligado com $\ell = 0$ no poço finito:

$$V(r) \;=\; \begin{cases} -U_0 & ,\;\; r < a \qquad ; \qquad U_0, a > 0 \\ 0 & ,\;\; r > a \quad . \end{cases}$$

6. Considere a parte radial $R_{k\ell}(r)$ da autofunção de uma partícula livre com energia $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$:

$$R_{k\ell} = (-1)^\ell \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\gamma^\ell}{k^\ell} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^\ell \frac{\operatorname{sen} kr}{r}$$

Mostre que para

$$r \to \infty \qquad R_{k\ell}(r) \cong \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{r}$$

e

$$r \to 0 \qquad R_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} r^\ell$$

$$(2\ell+1)!! = 1, 3, 5 \ldots (2\ell+1) \quad .$$

7. Calcule a degenerescência dos níveis de energia do átomo de hidrogênio dados por $E_N = -\dfrac{Z^2}{N^2} \left(\dfrac{me^4}{2\hbar^2} \right)$.