16: Autofunções do momento angular

- As autofunções da componente z do momento angular
- Autofunções simultâneas do momento angular total e da componente z
- Construção dos harmônicos esféricos
- Exercícios

Por razões técnicas é conveniente introduzir os operadores não-hermiteanos

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y \quad (279)$$

$$\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y \quad (280)$$

Seus principais comutadores são:

$$[\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_\pm] = 0 \quad (281)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_+] = \hat{l}_+ \quad (282)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_-] = -\hat{l}_- \quad (283)$$

todas fáceis de obter. Note-se ainda que

$$\hat{l}_+\hat{l}_- = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z \quad (284)$$

$$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z \quad (285)$$

As autofunções da componente z do momento angular

As autofunções de $\hat{l}_z$ são funções $\psi(\phi)$ tais que

$$\hat{l}_z\psi(\phi) = l_z\psi(\phi) \quad (286)$$

onde l_z é um número. Omitimos aqui, por simplicidade, as outras variáveis, r e θ, de que a função ψ em geral depende porque são irrelevantes para este problema. Como

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi}$$

temos, para a Eq.(286),

$$-i\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = l_z\psi \tag{287}$$

cuja solução é

$$\psi(\phi) = Ke^{il_z\phi} \quad .$$

Devemos ainda ter

$$\psi(\phi + 2n\pi) = \psi(\phi)$$

o que exige que

$$e^{il_z 2n\pi} = 1$$

ou seja, que l_z seja um número inteiro. Vamos denotá-lo por m. Então,

$$\hat{l}_z e^{im\phi} = me^{im\phi} \tag{288}$$

que é satisfeita para qualquer m inteiro, $-\infty < m < \infty$. Normalizando, temos

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(im\phi\right) \tag{289}$$

Autofunções simultâneas do momento angular total e da componente z

Seja $\psi(\phi)$ a autofunção de $\hat{l}_z$ de autovalor m. Calculemos

$$\begin{aligned}\hat{l}_z\left(\hat{l}^{+}\psi_m\right) &= (\hat{l}_z\hat{l}_{+} - \hat{l}_{+}\hat{l}_z + \hat{l}_{+}\hat{l}_z)\psi_m \\ &= [\hat{l}_z, \hat{l}_{+}]\psi_m + \hat{l}_{+}\hat{l}_z\psi_m \\ &= \hat{l}_{+}\psi_m + m\hat{l}_{+}\psi_m \\ &= (m+1)(\hat{l}_{+}\psi_m)\end{aligned}$$

Logo, se $\hat{l}_z\psi_m = m\psi_m$, então

$$\hat{l}_{+}\psi_m = K\psi_{m+1}$$

Analogamente se mostra que

$$\hat{l}_{-}\psi_m = K'\psi_{m-1}$$

Assim, usando os operadores $\hat{l}_{+}$ e $\hat{l}_{-}$, pode-se varrer todo o espectro do operador $\hat{l}_z$.

Considere o operador

$$\hat{\vec{l}}^{2} - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \quad .$$

Lema:*Se* $\hat{O}$ *é hermiteano,*

$$\langle \hat{O}^2 \rangle \geq 0 \tag{290}$$

para qualquer estado.

Demonstração:

$$\int dq \psi^*(q)\hat{O}^2\psi(q) = \int dq \left(\hat{O}\psi(q)\right)^* \left(\hat{O}\psi(q)\right) = \int dq |\hat{O}\psi(q)|^2 \geq 0$$

Em particular, segue que $\langle \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \rangle \geq 0$, logo,

$$\langle \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 \rangle \geq 0 \tag{291}$$

A construção das autofunções de $\hat{\vec{l}}^2$ é facilitada pelo fato de que a expressão de $\hat{\vec{l}}^2$ é um operador diferencial familiar à física clássica. De fato, um cálculo direto leva a

$$\hat{l}_\pm = \exp\left(\pm i\phi\right)\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{292}$$

e, como

$$\hat{\vec{l}}^2 = \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z$$

obtém-se

$$\hat{\vec{l}}^2 = -\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\right) \tag{293}$$

Acontece que o laplaceano em coordenadas esféricas é

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\right)\right\} \tag{294}$$

ou seja,

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\vec{l}}^2}{r^2} \tag{295}$$

Os físicos do século XIX resolveram o problema de determinar as autofunções de $\hat{\vec{l}}^2$:[18] essas funções são os *harmônicos esféricos*, $Y_{lm}(\theta,\phi)$, que satisfazem as equações de autovalores

$$\hat{\vec{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi) \quad (296)$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta,\phi) = mY_{lm}(\theta,\phi) \quad (297)$$

Os harmônicos esféricos são muito bem conhecidos. Para um estudo deles no contexto clássico as minhas referências preferidas são Courant [6] e Sommerfeld [9]. Nessas notas, usando técnicas que introduziremos a seguir, construiremos explicitamente os Y_{lm}. Para o momento é suficiente informar que

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = K\ P^l{}_m(\theta)\exp\left(im\phi\right)$$

ou seja, é o produto de uma função de θ por uma autofunção de $\hat{l}_z$.

Uma observação importante: as autofunções de $\hat{l}_z$ são as funções $\exp\left(im\phi\right)$ para qualquer inteiro m. Quando construirmos as autofunções comuns a $\hat{\vec{l}}^2$ e $\hat{l}_z$, veremos que m sofrerá mais restrições. De fato, como temos

$$\langle\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2\rangle \geq 0$$

Segue que

$$\int dqY^*_{lm}(q)\left(\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2\right)Y_{lm}(q) = \left(l(l+1) - m^2\right)\int dqY^*_{lm}(q)Y_{lm}(q) = \quad (298)$$

Portanto, dado l, m não pode ser qualquer inteiro. O maior valor permitido é tal que

$$l(l+1) \geq m^2$$

Vê-se imediatamente que $m = l$ é permitido, mas $m = l + 1$ é proibido. Logo, o máximo valor permitido de m para as autofunções $Y_{lm}(q)$ é $m = l$. Um argumento an'alogo mostra que o menor é $m = -l$. Resumindo,

$$-l \leq m \leq l$$

Neste intervalo,

$$\hat{\vec{l}}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{299}$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{300}$$

Assim, para cada l há $2l + 1$ valores distintos de m.

Construção dos harmônicos esféricos

Chamaremos de operadores vetoriais operadores do tipo

$$\hat{\vec{T}} = \hat{T}_x \vec{i} + \hat{T}_y \vec{j} + \hat{T}_z \vec{k}$$

e que satisfazem as seguintes relações de comutação com as componentes do momento angular:

$$[\hat{l}_a, \hat{T}_b] = i\epsilon_{abc} \hat{T}_c \tag{301}$$

onde a costumeira convenção indica uma soma sobre os valores do índice c, e, sendo $\hat{T}^{(1)}$ e $\hat{T}^{(2)}$ dois operadores desse tipo,

$$[\hat{l}_i, \hat{T}_j^{(1)}\hat{T}_j^{(2)}] = 0 \tag{302}$$

Exemplos: $\hat{r}$, $\hat{p}$ e $\hat{L}$ são, todos, operadores vetoriais.

Das relações acima segue, em particular, que, para qualquer operador vetorial $\hat{T}$,

$$[\hat{l}_i, \hat{T}_j\hat{T}_j] = 0 \tag{303}$$

Seja $\hat{\vec{T}}$ um operador vetorial. Será útil introduzir um ``operador escada'', da seguinte forma:

$$\hat{\vec{T}}_+ = \hat{T}_x + i\hat{T}_y \tag{304}$$

Facilmente se verifica que

$$[\hat{l}_z, \hat{T}_+] = \hat{T}_+ \tag{305}$$

bem como

$$[\hat{l}_x, \hat{T}_+] = -\hat{T}_z \tag{306}$$

$$[\hat{l}_y, \hat{T}_+] = -i\hat{T}_z \tag{307}$$

Vamos agora calcular o comutador $[\hat{\vec{l}}^2, \hat{T}_+]$. Lembrando que

$$\hat{\vec{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

e usando as relações acima, temos, após um pouco de paciência,

$$[\hat{\vec{l}}^2, \hat{T}_+] = 2[\hat{T}_+\hat{l}_z - \hat{T}_z\hat{l}_+] + 2\hat{T}_+ \tag{308}$$

Sejam Y_{lm} as autofunções de $\hat{\vec{l}}^2$ e, em particular, seja Y_{ll} aquela com máximo valor de m, para um dado l. Vamos mostrar que

$$\hat{T}_+ Y_{ll} = K Y_{l+1,l+1} \tag{309}$$

onde K é uma constante.

De fato,

$$\hat{\vec{l}}^2 Y_{ll} = l(l+1) Y_{ll} \tag{310}$$

$$\hat{T}_+(\hat{\vec{l}}^2 Y_{ll}) = l(l+1)\hat{T}_+ Y_{ll} \tag{311}$$

Ora, o operador $\hat{T}_+\hat{\vec{l}}^2$ pode ser escrito assim:

$$\hat{T}_+\hat{\vec{l}}^2 = \hat{T}_+\hat{\vec{l}}^2 - \hat{\vec{l}}^2\hat{T}_+ + \hat{\vec{l}}^2\hat{T}_+ = [\hat{T}_+, \hat{\vec{l}}^2] + \hat{\vec{l}}^2\hat{T}_+ \tag{312}$$

Logo,a Eq.(311) pode ser escrita

$$[\hat{T}_+, \hat{\vec{l}}^2] Y_{ll} + \hat{\vec{l}}^2(\hat{T}_+ Y_{ll}) = l(l+1) Y_{ll} \tag{313}$$

Usando a Eq.(308),

$$2\hat{T}_z\hat{l}_+ Y_{ll} - 2\hat{T}_+\hat{l}_z Y_{ll} - 2\hat{T}_+ Y_{ll} + \hat{\vec{L}}^2(\hat{T}_+ Y_{ll}) = l(l+1)(\hat{T}_+ Y_{ll}) \tag{314}$$

Como $\hat{l}_+ Y_{ll} = 0$, obtemos sem dificuldade que

$$\hat{\vec{l}}^2 (\hat{T}_+ Y_{ll}) = (l(l+1) + 2l + 2) (\hat{T}_+ Y_{ll}) \tag{315}$$

ou, finalmente,

$$\hat{\vec{l}}^2 (\hat{T}_+ Y_{ll}) = (l+1)(l+2)(\hat{T}_+ Y_{ll} \tag{316}$$

que significa que $\hat{T}_+ Y_{ll}$ é autofunção de $\hat{\vec{l}}^2$ de autovalor $(l+1)(l+2)$. Logo,

$$\hat{T}_+ Y_{ll} = K Y_{l+1,l+1} \tag{317}$$

Este resultado mostra que, se determinarmos Y_{00}, seremos capazes de construir Y_{ll} para qualquer l, sem ter de resolver equações diferenciais.

Para determinar $Y_{00}(\theta, \phi)$ note-se que

$$\hat{l}_z Y_{00}(\theta, \phi) = 0 \tag{318}$$

e

$$\begin{aligned} \hat{l}_- Y_{00} &= 0 \\ \hat{l}_+ Y_{00} &= 0 \end{aligned}$$

Daí segue facilmente que

$$\hat{l}_x Y_{00} = 0 \tag{319}$$

$$\hat{l}_y Y_{00} = 0 \tag{320}$$

Dessas duas e da Eq.(318), segue que

$$\left(1+\frac{i}{\hbar}\epsilon\hbar\hat{l}_j\right)Y_{00}=Y_{00} \tag{321}$$

para $j=1,2,3$. Isto quer dizer que Y_{00} é invariante por rotações infinitesimais em torno dos eixos x, y, z, ou seja, é invariante por qualquer rotação infinitesimal. Logo, é esfericamente simétrica, não podendo depender de θ ou ϕ. Mas essas são as suas únicas variáveis. Portanto, Y_{00} é constante. A menos de normalização , podemos então tomar

$$Y_{00}=1$$

Considere o operador vetorial $\hat{\vec{r}}$, e vamos construir o operador $\hat{T}_+$ associado a ele,que seria o operador

$$\hat{\vec{r}}_+=\hat{x}+i\hat{y}$$

Como os operadores $\hat{x}$ e $\hat{y}$ são multiplicativos, vamos cometer um ligeiro abuso de notação, omitindo a ``casinha''(acento circunflexo, versão chinesa). Assim, escreveremos, sem a menor cerimônia,

$$\vec{r}_+=x+iy$$

deixando claro que se trata de operadores. Já que estamos com a mão na massa, vamos estudar, em lugar de $\vec{r}$, o operador $\frac{\vec{r}}{r}$. O operador $\hat{T}_+$ associado a ele é

$$\hat{T}_+=\frac{x+iy}{r} \tag{322}$$

Temos, então,

$$\mathrm{x+iy}\frac{}{r.Y_{00}=\frac{x+iy}{r}.1=\frac{x+iy}{r}=KY_{11}(\theta,\phi)} \tag{323}$$

ou seja,

$$Y_{11}(\theta,\phi) = cte. \ \times \frac{x+iy}{r} = cte. \ \times (\sin\theta\cos\phi + i\sin\theta\sin\phi) \tag{324}$$

ou ainda,

$$Y_{11}(\theta,\phi) = cte. \ \times \sin\theta \exp(i\phi) \tag{325}$$

De uma maneira geral, teremos:

$$Y_{ll}(\theta,\phi) = K\left(\frac{x+iy}{r}\right)^l \tag{326}$$

Para obter Y_{lm} basta fazer uso do operador $\hat{l}_-$.

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = K\left(\hat{l}_-\right)^{l-m}\left(\frac{x+iy}{r}\right)^l \tag{327}$$

A determinação de K é feita pela normalização dos Y_{lm},

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta |Y_{lm}(\theta,\phi) = 1 \tag{328}$$

Toma-se usualmente K real, o que fornece a seguinte tabela de harmônicos esféricos:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1,\pm1} &= \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \end{aligned}$$

$$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta \tag{329}$$

e assim por diante.

Exercícios

1. Prove que $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$

2. Prove que, se $[H, l_i] = 0$ então $[H, \exp \frac{i}{\hbar}\theta\hbar l_i] = 0$, com l_i $i = 1, 2, 3$ sendo as componentes do operador de momento angular. De fato, o resultado vale para qualquer operador que comute com o hamiltoniano H, e, portanto, para o próprio H. Enuncie e comente este último caso. Mais precisamente, mostre que é sempre verdade que $[\hat{H}, \exp -\frac{i}{\hbar}\hat{H}t] = 0$.

3. Mostre que o operador $\hat{1} + \frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hbar\hat{l}_i$ "roda" o sistema de um ângulo infinitesimal $\Delta\theta$ em torno do eixo i. A generalização para ângulos θ arbitrários é $\exp \frac{i}{\hbar}\theta\hbar\hat{l}_i$. Seja $U(\theta) = \exp \frac{i}{\hbar}\theta\hbar\hat{l}_i$. Vimos no exercício anterior que, se $[H, l_i] = 0$, então $[H, U(\theta)] = 0$. Seja ψ tal que $H\psi = E\psi$,e considere $\psi' = U(\theta)\psi$. Mostre que $H\psi' = E\psi'$, com o mesmo E anterior. Chegue a uma conclusão análoga usando o último resultado do exercício 2.

4. Mostre que se a energia potencial de um sistema é $V(r)$, independente de θ e ϕ, então $[H, l_i] = 0$, para $i = 1, 2, 3$.

5. Mostramos no curso que

$$\begin{aligned} \langle m|l_x|\ m-1\rangle &= \langle m-1|l_x|m\rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \\ \langle m|l_y|m-1\rangle &= -\langle m-1|l_y|m\rangle &= -\frac{i}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \end{aligned}$$

que, trocado em miúdos, quer dizer que

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y_{lm}^* l_x Y_{l,m-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

(a) Escreva os demais elementos de matriz dessa forma.

(b) Considere o harmônico esférico $Y_{lm}(\theta, \phi = \pi/2)$. Temos

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hbar l_x\right) Y_{lm}(\theta,\pi/2) = Y_{lm}(\theta+\Delta\theta,\pi/2)$$

Por outro lado, $exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hbar l_x\right) = 1 + i\delta\theta l_x$ e, usando os elementos de matriz acima,

$$\begin{aligned}(1+i\Delta\theta l_x)Y_{lm}(\theta,\pi/2) &= Y_{lm}(\theta,\pi/2) + i\frac{\Delta\theta}{2}\sqrt{(l+m+1)(l-m)}Y_{l,m+1}(\theta,\pi/2) \\ &+ i\frac{\Delta\theta}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{l,m-1}(\theta,\pi/2)\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}Y_{lm}(\theta+\Delta\theta,\pi/2) &= Y_{lm}(\theta,\pi/2) + i\frac{\Delta\theta}{2}\sqrt{(l+m+1)(l-m)}Y_{l,m+1}(\theta,\pi/2) \\ &+ i\frac{\Delta\theta}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{l,m-1}(\theta,\pi/2)\end{aligned}$$

Verifique cuidadosamente o argumento acima (o professor já está meio velho...) e depois teste-o no caso particular l=1. Neste caso os harmônicos esféricos são:

$$\begin{aligned}Y_{1,0} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta \\ Y_{1,\pm1} &= \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta e^{\pm i\phi}\end{aligned}$$