15: Rotações e o momento angular

Uma partícula de massa m está em um estado de função de onda $\psi(\vec{r})$. Vamos executar uma rotação infinitesimal $\delta\vec{\omega}$ sobre o sistema.[16] Em sua nova posição,a função de onda será

$$\psi(\vec{r}+\delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{\omega}\times\vec{r}).\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) \ \ ,$$

desprezando-se os termos a partir dos quadráticos em $|\delta\vec{\omega}|$. Como

$$(\delta\vec{\omega}\times\vec{r}).\vec{\nabla} = \delta\vec{\omega}.(\vec{r}\times\vec{\nabla})$$

podemos escrever

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}+\delta\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) + \delta\vec{\omega}.(\vec{r}\times\vec{\nabla}).\psi(\vec{r}) \\
&= \left(1 + \delta\vec{\omega}.(\vec{r}\times\vec{\nabla})\right)\psi(\vec{r}) \\
&= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}.(\vec{r}\times(-i\hbar)\vec{\nabla})\right)\psi(\vec{r})
\end{aligned} \qquad (264)$$

$$\psi(\vec{r}+\delta\vec{r}) = \left(1 + \tfrac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}.(\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})\right)\psi(\vec{r}) \qquad (265)$$

Denotando o operador $\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$ por $\hat{\vec{L}}$, temos

$$\psi(\vec{r}+\delta\vec{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}.\hat{\vec{L}}\right)\psi(\vec{r}) \qquad (266)$$

O operador $\hat{\vec{L}}$ é denominado momento angular, e é escrito, mais detalhadamente, como

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

Da Eq.(264) se tira a expressão

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\hat{\vec{r}}\times\vec{\nabla} \qquad (267)$$

ou, para as componentes,

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{268}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{269}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{270}$$

Como $\hat{\vec{L}}$ é hermiteano (por que?),

$$\hat{U}(\delta\vec{\omega}) = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}.\hat{\vec{L}}$$

é unitário, e é a parte infinitesimal de

$$\hat{U} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}.\hat{\vec{L}}}$$

que, atuando sobre a função de onda de um sistema, produz a função de onda do mesmo,roda do de $\delta\vec{\omega}$.

Exemplo:

(1) Rotação em torno do eixo z: usando coordenadas esféricas, uma rotação em torno do eixo z muda o valor da coordenada ϕ. A rotação que leva ϕ em $\phi + \Delta\phi$ é caracterizada por $\delta\vec{\omega} = \delta\omega_z\vec{k}$, com $\delta\omega_z = \Delta\phi$. Logo,

$$U(\delta\vec{\omega}) = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\omega_z\vec{k}.\hat{\vec{L}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\Delta\phi\hat{L}_z$$

Seja $\psi(\phi)$ a função de onda do sistema (explicitamos apenas o argumento que será alterado. A função de onda normalmente dependerá de r, θ e ϕ, quando o sistema é descrito em termos de coordenadas esféricas). A rotação considerada leva $\psi(\phi) \rightarrow \psi(\phi + \Delta\phi)$. Mas

$$\psi(\phi + \Delta\phi) = \psi(\phi) + \Delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\psi(\phi) = \left(1 + \Delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right)\psi(\phi)$$

para transformações infinitesimais, e usando a fórmula dos acréscimos finitos do Cálculo. Outra maneira de escrever isto é

$$\psi(\phi + \Delta\phi) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\Delta\phi \hat{L}_z\right)\psi(\phi)$$

Comparando as duas expressões, tira-se facilmente que

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \tag{271}$$

A expressão explícita dos operadores $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$ em coordenadas esféricas pode também ser obtida diretamente da Eq.(270) utilizando as fórmulas de transformação

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta &= \arctan\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \\ \phi &= \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \quad . \end{aligned}$$

Trata-se de um cálculo simples mas trabalhoso. Vamos seguir um caminho indireto mas mais iluminante. Primeiro, é conveniente medir o momento angular em unidades de $\hbar$, isto é, introduzir o operador $\hat{\vec{l}}$ tal que

$$\hat{\vec{L}} = \hbar \hat{\vec{l}}$$

onde , de novo,

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

As expressões para as componentes de $\hat{\vec{l}}$ são, como segue de (270),

$$\hat{l}_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{272}$$

$$\hat{l}_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{273}$$

$$\hat{l}_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{274}$$

Por um cálculo direto, ou pelo uso da regra de Dirac[17] obtêm-se:

$$[\hat{l}_a, \hat{l}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{l}_c \tag{275}$$

Como as componentes $\hat{\vec{l}}$ não comutam entre si, não há autofunções comuns dessas componentes. Introduzindo o momento angular total

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

observamos que

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

Como

$$[\hat{l}_x^2, \hat{l}_x] = 0 \tag{276}$$

$$[\hat{l}_y^2, \hat{l}_x] = -i\hat{l}_y\hat{l}_z - i\hat{l}_z\hat{l}_y \tag{277}$$

$$[\hat{l}_z^2, \hat{l}_x] = i\hat{l}_z\hat{l}_y + i\hat{l}_y\hat{l}_z \tag{278}$$

segue que

$$[\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_x] = 0$$

A direção x não tendo nenhum privilégio, segue que:

$$[\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_y] = [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_z] = 0 \; ,$$

Sendo assim, podemos construir autofunções comuns a $\hat{\vec{l}}^2$ e uma das componentes de $\hat{\vec{l}}$. Por causa da expressão simples de $\hat{l}_z$ em coordenadas esféricas, escolhemos o par $\hat{\vec{l}}^2$, $\hat{l}_z$.