

Química Teórica e Estrutural:

Aula 7

P.J.S.B. Caridade & U. Miranda

November 19, 2012

Momento Angular II

Momento angular: Formalismo genérico

- Existe um conjunto de funções próprias comum a $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$.
- Entre as componentes não existe esse conjunto, mas cada uma comuta com $\hat{J}^2$, escolhemos $\hat{J}_z$.
- Seja $|\alpha, \beta\rangle$ a função própria de $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$, então, procuramos soluções simultâneas de:

$$\hat{J}^2|\alpha, \beta\rangle = \hbar^2\alpha|\alpha, \beta\rangle$$

$$\hat{J}_z|\alpha, \beta\rangle = \hbar\beta|\alpha, \beta\rangle$$

$\hbar$ foi colocado para que α e β venha adimensional e L_z tenha unidades de energia×tempo.

- assumindo que os estados são ortonormais $\langle\alpha', \beta|\alpha, \beta\rangle = \delta_{\alpha', \alpha}\delta_{\beta', \beta}$.

Momento angular: operadores escada

- Definam-se dois operadores escada:

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

- Desta definição vem que:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$$

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$$

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar \hat{J}_z = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar \hat{J}_z = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$$

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_z^2$$

Momento angular: valores próprios

- Como $\hat{J}_\pm$ não comuta com $\hat{J}_z$, $|\alpha, \beta\rangle$ não é função própria de $\hat{J}_\pm$.
- Dado que

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle = \hbar(\beta \pm 1) \hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle$$

logo $\hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle$ é função própria de $\hat{J}_z$.

- Como $\hat{J}_z$ comuta com $\hat{J}^2$ e $[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$, temos

$$\hat{J}^2(\hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle) = \hbar^2 \alpha (\hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle)$$

- Das duas equações anteriores, concluímos que:

$$\hat{J}_\pm |\alpha, \beta\rangle = C_{\alpha\beta,\pm} |\alpha, \beta \pm 1\rangle$$

PORQUÊ?

- Quando $\hat{J}_\pm$ actua sobre $|\alpha, \beta\rangle$, α não é alterado, enquanto que β passa a $\beta \pm 1$.

Momento angular: valores próprios (cont)

- Dado que $\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2$ é positivo (mostrar que!) concluí-se que $\alpha \geq \beta^2$, ou seja, existe um $\beta_{\max}$.
- Para o estado com um valor próprio $\beta_{\max}$: $\hat{J}_+ |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$
- Aplicando $\hat{J}_- \hat{J}_+$ ao estado $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$ concluí-se que:

$$\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + 1)$$

- Após aplicar o operador escada descida n vezes ao estado $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$, obtém-se o estado mínimo $|\alpha, \beta_{\min}\rangle$, o qual é o limite mínimo:

$$\hat{J}_- |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0$$

- Por analogia, aplicando $\hat{J}_+$, podemos escrever

$$\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} - 1)$$

Momento angular: valores próprios (cont)

- Por $\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + 1)$ e $\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} - 1)$, concluí-se:

$$\beta_{\max} = -\beta_{\min}$$

- Como aplicámos n vezes o operador descida para obter $|\alpha, \beta_{\min}\rangle$:

$$\beta_{\max} = \beta_{\min} + n = \frac{n}{2}$$

- Designando $j = \beta_{\max} = n/2$ e $m = \beta$, o valor próprio de $\hat{J}^2$ será:

$$\alpha = j(j + 1)$$

- Como $\beta_{\min} = -\beta_{\max}$ e n é positivo:

$$-j \geq m \geq j$$

Momento angular: valores próprios (cont)

- Resumindo:

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$$

- Ou seja, o espectro do momento angular está quantificado!

Momento angular: Operadores escada

- Recordando: $|j, m\rangle$ não é função própria de $\hat{J}_{\pm}$.
- Partindo de:

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = C_{jm,\pm} |j, m \pm 1\rangle$$

e admitindo que $|j, m\rangle$ está normalizada, podemos escrever:

$$\begin{aligned} (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle)^{\dagger} (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) &= |C_{jm,\pm}|^2 \langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = |C_{jm,\pm}|^2 \\ (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle)^{\dagger} (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) &= (\langle j, m | \hat{J}_{\pm}^{\dagger}) (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) = \langle j, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle \\ |C_{jm,\pm}|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle \end{aligned}$$

- Sabendo que $\hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z$, obtém-se:

$$C_{jm,\pm} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$$

- Logo:

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

Momento angular: Operadores $\hat{J}_x$ e $\hat{J}_y$

■ Sabendo que

$$J_x|j, m\rangle = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)|j, m\rangle$$

$$J_y|j, m\rangle = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)|j, m\rangle$$

concluí-se que:

$$J_x|j, m\rangle = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \right]$$

$$J_y|j, m\rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \right]$$