

Química Teórica e Estrutural:

Aula 8

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

21 de Novembro de 2012

Momento Angular III: Representação matricial, orbital e spin

Representação matricial: Formulação geral

- Consideremos um operador linear $\hat{A}$:

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{I} \hat{A} \hat{I} = \left(\sum_n^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) \hat{A} \left(\sum_m^{\infty} |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \right) \\ &= \sum_{nm} A_{nm} |\phi_n\rangle \langle \phi_m|\end{aligned}$$

$$A_{nm} = \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle$$

Representação matricial do momento angular

- Como $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ comutam, existe um conjunto de vectores próprios comuns, $|j, m\rangle$.
- A base é discreta, ortonormal e completa.
- Considerando um valor de j , a condição de ortonormalidade é dada por:

$$\sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle\langle j, m| = \hat{I}$$

- A representação matricial de $\hat{J}^2$ é dada por

$$\begin{aligned}\hat{I}\hat{J}^2\hat{I} &= \left(\sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle\langle j, m| \right) \hat{J}^2 \left(\sum_{m'=-j'}^{+j'} |j', m'\rangle\langle j', m'| \right) \\ &= \sum_{m=-j}^{+j} \sum_{m'=-j'}^{+j'} \hat{J}_{j'm'jm}^2 |j, m\rangle\langle j' m'|\end{aligned}$$

Representação matricial do momento angular

- $\hat{J}^2$ e $\hat{J}_z$ são diagonais:

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

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

- Como $\hat{J}_\pm$ não comutam com $\hat{J}_z$, na base $\{|j, m\rangle\}$ será dados por matrizes não diagonais:

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

Momento angular orbital

- Vectores próprios: Esféricas harmónicas, $Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi_{m_\ell}(\phi)$.
- Valores próprios, ℓ e m_ℓ :

$$\hat{L}^2|\ell, m_\ell\rangle = \hbar^2\ell(\ell + 1)|\ell, m_\ell\rangle$$

$$\hat{L}_z|\ell, m_\ell\rangle = \hbar m_\ell|\ell, m_\ell\rangle$$

- ℓ inteiro e $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$.

Momento angular de spin

- Stern e Gerlach (1922).
- Não depende de coordenadas espaciais.
- A função de onda indica apenas spin up e spin down.
- Regras de momento angular:

$$\hat{S}^2|s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s + 1)|s, m_s\rangle$$

$$\hat{S}_z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle$$

- O espaço vectorial é um espaço de Hilbert complexo a duas dimensões.
- Para uma partícula com spin 1/2, o resultado só pode ser $\pm\hbar/2$.