

Momento Angular

Química Teórica e Estrutural

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

18/11/2013 – 21/11/2013, Aula 6

Momento angular orbital

- ▶ Em mecânica clássica o momento angular orbital tem um papel relevante em muitos sistemas físicos.
- ▶ O princípio da conservação do momento angular é uma ferramenta essencial na descrição de orbitas planetárias, satélite, giroscópios.
- ▶ O momento angular clássico, $\vec{L}$, de uma partícula com um momento linear $\vec{p}$ e uma posição instantânea $\vec{r}$ é dado por:

$$\begin{aligned}\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \\ &= (yp_z - zp_y)\hat{i} - (xp_z - zp_x)\hat{j} + (xp_y - yp_x)\hat{k} \\ &= L_x\hat{i} + L_y\hat{j} + L_z\hat{k}\end{aligned}$$

- ▶ Magnitude do valor do momento angular orbital:

$$\vec{L}\vec{L} = L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Momento angular orbital: medições

- ▶ Usando os postulados da mecânica quântica...

$$\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

- ▶ A componente $\hat{L}_z$ vem dada por:

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

- ▶ Permutação cíclica $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$.
- ▶ Sabendo que $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$, $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$ e $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$, conclui-se que $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$ não comutam, logo não as conseguimos medir simultaneamente.
- ▶ E $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$? **Sim...**

Momento angular: Formalismo genérico

- ▶ Existem dois tipos de momento angular em mecânica quântica: orbital $\mathbf{L}$ e de spin $\mathbf{S}$. Como têm propriedades em comum vamos definir um momento angular generalizado $\mathbf{J}$.
- ▶ Como $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$, $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \neq 0$, $[\hat{J}_y, \hat{J}_z] \neq 0$ e $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] \neq 0$
 - ▶ 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 $\times$ 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:

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

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

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

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

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

$$\hat{J}_x^2$$

$$\hat{J}_y^2$$

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?

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 $\beta_{\max}$, o operador subida é nulo: $\hat{J}_+|\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$.
- ▶ 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 quantizado!

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:

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

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