

Teoria do momento angular [SAK 3.1]

- rotações em torno de eixos diferentes não comutam. Veremos que as relações de comutação dos componentes do momento angular são consequência disso.
- Vamos começar estudando ~~como~~ essa não-comutatividade das rotações.

Exemplo da não-comutatividade de rotações

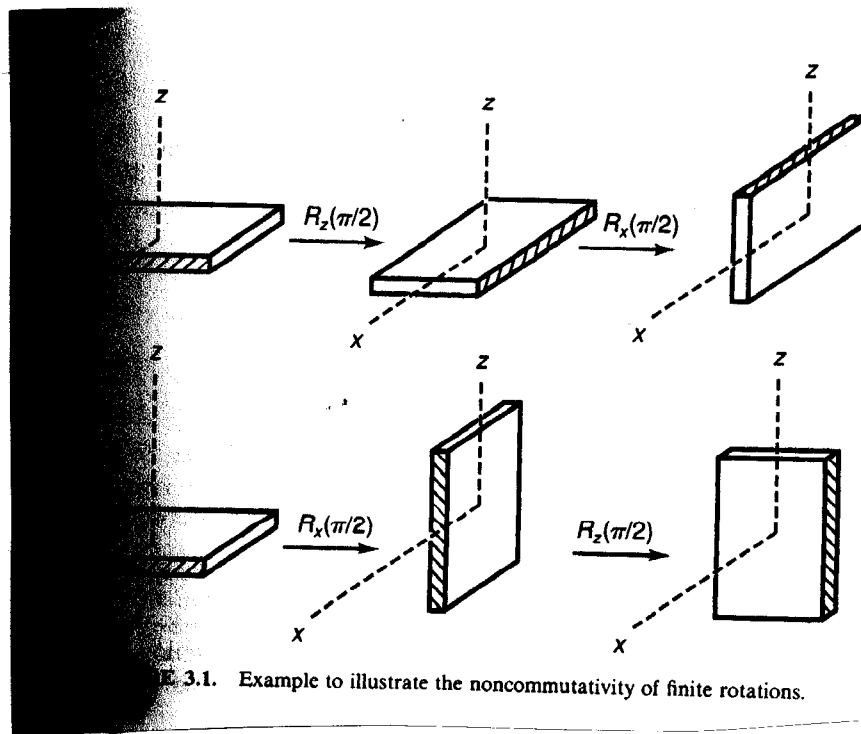


FIG. 3.1. Example to illustrate the noncommutativity of finite rotations.

ROTAÇÕES no espaço R_3

- Representadas por matrizes 3×3 reais e ortogonais: $RR^T = R^T R = \mathbb{I}$.
- Vetores se transformam assim:
$$\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$
- Matrizes ortogonais preservam a norma de $\vec{v}$.

ROTAÇÃO de ϕ em torno de $\hat{z}$

- Sentido positivo = rotação avançada na direção $\hat{z} > 0$.

$$R_z = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_y = \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix}$$

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$

ROTAÇÕES INFINITESIMAIS

- $\cos\phi \approx 1 - \frac{\phi^2}{2}$, $\sin\phi \approx \phi$ nas matrizes acima.

$$\bullet \text{ Calculando } R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\epsilon^2) - \mathbb{I}$$

(ignorando termos de ordem ϵ^2).

$\Rightarrow$ Rotações infinitesimais em torno de eixos diferentes comutam até ordem ϵ .

$\Rightarrow$ Não comutam até ordem ϵ^2 .

ROTAÇÕES INFINITESIMAIS NA MQ

- O estado (ket) descrevendo um int. quântico vai mudar sob rotação.
- Dado um op. de rotação R (= matriz ortogonal, 3×3), associamos um op. unitário $D(R)$ no espaço $\mathcal{H}$ tal que

$$\begin{array}{ccc} |d\rangle_R = D(R)|\alpha\rangle \\ \uparrow \text{rotado} & & \uparrow \text{original} \end{array}$$

- Repare que a mesma rotação R corresponde a vários op unitários $D(R)$,
correspondentes ao eixo de spin $\frac{1}{2} \rightarrow D(R)$ é unitário 2×2

$$\text{spin } 1 \rightarrow D(R) \quad 3 \times 3$$

- Já construímos dois operadores unitários infinitesimais, com forma $U_\xi = 1 - iG\xi$

Translação: $G = \frac{P_x}{\hbar} \quad \xi = dx$

evolução temporal: $G = \frac{H}{\hbar} \quad \xi = dt$

- $\Rightarrow$ Definimos o op. de momento angular J_K tal que $G = \frac{J_K}{\hbar} \quad \xi \rightarrow d\phi$,

$D(R_K, \xi) = 1 - i \frac{J_K}{\hbar} d\phi$ descreve rotação infinitesimal em torno do eixo K por ângulo $d\phi$.

- De forma mais geral: $D(\hat{n}, d\phi) = 1 - i \left(\frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) d\phi$ = op. de rotação infinit. $d\phi$ em torno de $\hat{n}$.

- A partir do op infinitesimal, encontramos o op. de rotações finitas:

$$D_z(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - i \frac{J_z}{\hbar} \frac{\phi}{N} \right)^N = \exp\left(-i \frac{J_z \phi}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i J_z \phi}{\hbar} - \frac{J_z^2 \phi^2}{2\hbar^2} + \dots$$

- Matrizes de rotações R formam um grupo. Postulamos que $D(R)$ também logo deve ter as propriedades:

- Identidade: $R \cdot 1 = R$ $D(R) \cdot 1 = D(R)$

- Fechamento: $R_1 R_2 = R_3$ $D(R_1) D(R_2) = D(R_3)$

- Inverso: $R R^{-1} = 1$ $D(R) D^{-1}(R) = 1$

$R^{-1} R = 1$ $D^{-1}(R) D(R) = 1$

- Associatividade: $R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3$

$D_1(D_2 D_3) = (D_1 D_2) D_3 = D_1 D_2 D_3$

- Vamos agora usar isso p/ achar as relações de comutação p/ J_K :

• Se que $R_x(\epsilon) R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon) R_x(\epsilon) = R_z(\epsilon^2) - 1$ A relação equivalente p/ D 's é:

$$\left(1 - \frac{i J_x \epsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2 \hbar^2}\right) \left(1 - \frac{i J_y \epsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2 \hbar^2}\right)$$

$$- \left(1 - \frac{i J_y \epsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \epsilon^2}{2 \hbar^2}\right) \left(1 - \frac{i J_x \epsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \epsilon^2}{2 \hbar^2}\right) = 1 - \frac{i J_z \epsilon^2}{\hbar} - 1$$

- Igualando os termos de ordem ϵ^2 nos 2 lados da eqnç obtemos

$$\boxed{[J_x, J_y] = i \hbar J_z}$$

• Repetindo o argumento p/ outras rotações $\boxed{[J_i, J_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} J_k}$

= relações de comutação fundamentais p/ o momento angular.

- Só usamos que $\int$ ① J_K é o gerador de rotações em torno do eixo K .
② Rotações em torno de eixos diferentes não comutam.

ROTACÕES de spin $\frac{1}{2}$

- Já encontramos os operadores que representam S_x, S_y e S_z de spin $\frac{1}{2}$:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|+X\rangle\langle +| + |-X\rangle\langle -|)$$

$$S_y = i\frac{\hbar}{2} (-|+X\rangle\langle -| + |-X\rangle\langle +|)$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+X\rangle\langle +| - |-X\rangle\langle -|)$$

Na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ de S_z :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Vamos rodar $|+\rangle$ por ang. ϕ em torno do eixo z :

~~$$|+\rangle \rightarrow D_z(\phi) |+\rangle$$~~

~~$$|+\rangle \rightarrow D_z(\phi) |+\rangle$$~~

$$|+\rangle_R = \underbrace{\exp\left(-i\frac{S_z\phi}{\hbar}\right)}_{D_z(\phi)} |+\rangle$$

- Verificando o efeito sobre $\langle S_x \rangle$:

$$\langle S_x \rangle \rightarrow \langle + | S_x | + \rangle_R = \langle + | D_z^\dagger(\phi) S_x D_z(\phi) | + \rangle$$

$$\left[\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(-\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) \right] \rightarrow \text{Vamos calcular de 2 formas.}$$

$$\textcircled{I} \quad \frac{\hbar}{2} \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) (|+X\rangle\langle +| + |-X\rangle\langle -|) \exp\left(-\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)$$

$$\text{Note: } S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \Rightarrow e^{i\frac{S_z\phi}{\hbar}} |+\rangle = \left(1 + \frac{iS_z\phi}{\hbar} + \frac{i^2 S_z^2 \phi^2}{2\hbar^2} + \dots\right) |+\rangle$$

$$= \left(1 + \frac{i\phi}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{2} + \frac{i^2 \phi^2}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{4}\right) + \dots\right) |+\rangle$$

$$= \left(1 + \frac{i\phi}{2} + \left(\frac{i\phi}{2}\right)^2 + \dots\right) |+\rangle = e^{\frac{i\phi}{2}} |+\rangle$$

$$\text{Simultaneamente: } \langle - | e^{-\frac{iS_z\phi}{\hbar}} = \langle - | e^{\frac{i\phi}{2}}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{2} \left(e^{i\frac{\phi}{2}} |+X\rangle\langle +| e^{i\frac{\phi}{2}} + e^{-i\frac{\phi}{2}} |-X\rangle\langle -| e^{-i\frac{\phi}{2}} \right) =$$

~~$$\frac{\hbar}{2} \left((|+X\rangle\langle +| + |-X\rangle\langle -|) \cos\phi + i(|+X\rangle\langle -| - |-X\rangle\langle +|) \sin\phi \right)$$~~

$$= \frac{\hbar}{2} \left[(|+X\rangle\langle +| + |-X\rangle\langle -|) \cos\phi + i(|+X\rangle\langle -| - |-X\rangle\langle +|) \sin\phi \right]$$

$$= S_x \cos\phi - S_y \sin\phi$$

- II) Use Baker-Hausdorff: (G Hermitian, λ real)

$$\exp(i\lambda G) A \exp(-i\lambda G) = A + i\lambda [G, A] + \frac{i^2 \lambda^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots + \frac{i^n \lambda^n}{n!} [G, [G, [G, \dots [G, A]]]]$$

$$e^{\frac{iS_z \phi}{\hbar}} S_x e^{-\frac{iS_z \phi}{\hbar}} = S_x + \frac{i\phi}{\hbar} \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y} + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^2 \underbrace{[S_z, [S_z, S_x]]}_{i\hbar^2 S_x} +$$

$$+ \frac{1}{3!} \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^3 \underbrace{[S_z, [S_z, [S_z, S_x]]]}_{i\hbar^3 S_y} + \dots$$

$$= S_x \left[1 - \frac{\phi^2}{2!} + \dots\right] - S_y \left[\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \dots\right] = \underline{S_x \cos \phi - S_y \sin \phi}$$

Note que o método II nos dá a representação explícita de S_x , no caso de rotações de comutação, logo pode ser usado em rot. com momento angular $> \frac{1}{2}$.

• Temos então: $\langle S_x \rangle \rightarrow \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \phi - \langle S_y \rangle \sin \phi$

De forma similar: $\langle S_y \rangle \longrightarrow \langle S_y \rangle \cos \phi + \langle S_x \rangle \sin \phi$

$$\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle \quad (\text{pois } [S_z, D_z(\phi)] = 0).$$

$\Rightarrow$ os valores esperados são rotados de ϕ em torno do $\hat{z}$, como esperado.

• De maneira mais geral, op. de momento angular (p. q. H) satisfazem:

$$\langle J_K \rangle \rightarrow \sum_x R_{Kx} \langle J_x \rangle$$

$\nwarrow$ matriz de rotação

- Vamos agora examinar o efeito de rotações no eixo z sobre estado arbitrário de spin $\frac{1}{2}$: $|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle$

$$e^{-\frac{iS_z t}{\hbar}} |\alpha\rangle = e^{-\frac{i\hbar}{2}} |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + e^{\frac{i\hbar}{2}} |-\rangle\langle -|\alpha\rangle$$

- Se fizermos rotações de 2π : $|\alpha\rangle \rightarrow -|\alpha\rangle$!

$$4\pi: |\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle \text{ de novo.}$$

Este efeito estranho tem consequências observáveis.

Precessão de spin $\frac{1}{2}$ como rotação

- Campo $\vec{B} = B\hat{e}_z$. $H = -\frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} = \omega S_z$ com $\omega \equiv \frac{e\hbar B}{mc}$

- O operador de evolução temporal é: $U(t,0) = \exp(-\frac{iHt}{\hbar}) = \exp(-\frac{iS_z \omega t}{\hbar})$

ou seja, é igual ao op de rotações em torno de $\hat{e}_z$ por ângulo $\phi = \omega t$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle S_x \rangle_t = \langle S_x \rangle_{t=0} \cos \omega t - \langle S_y \rangle_{t=0} \sin \omega t \\ \langle S_y \rangle_t = \langle S_y \rangle_{t=0} \cos \omega t + \langle S_x \rangle_{t=0} \sin \omega t \\ \langle S_z \rangle_t = \langle S_z \rangle_0 \end{cases}$$

Depois de $t = \frac{2\pi}{\omega}$, o spin dá 1 volta

$t = \frac{4\pi}{\omega}$, o spin volta ao estado inicial.

- Experimentos que observam esse efeito foram feitos (K75-RAUCH et al.)
Werner et al.

[Feixe de nêutrons é dividido, um sub-feixe precessiona e outro não, a diferença de fase resulta em interferência quando feixes são recombinados.]

Autovalores e auto-estados de momento angular

- Tudo que precisamos re fazer nas relações de comutação de J_K :

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

- Começo definindo o op. de momento angular total ao quadrado J^2 :

$$J^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

- Propriedade de J^2 : $[J^2, J_k] = 0$

Vamos olhar p/ $[J^2, J_z] = [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z]$

$$= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y = 0$$

$-i\hbar J_y \quad -i\hbar J_y \quad i\hbar J_x \quad i\hbar J_x$

e simetricamente p/ os outros componentes.

- Como os componentes J_K não comutam entre si, precisamos escolher um deles p/ formar base junto com $J^2 \Rightarrow$ por conveniência, J_z .

Operadores-escada

$$J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$$

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

- Para facilitar a, b, é conveniente definir os operadores-escada

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y$$

É fácil mostrar que

$$\begin{cases} [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \\ [J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm} \\ [J^2, J_{\pm}] = 0 \end{cases}$$

• Por qué llamamos de operadores-escala?

$$J_z(J_{\pm}|a,b\rangle) = ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm}J_z)|a,b\rangle = (b \pm \hbar)(J_{\pm}|a,b\rangle)$$

$\Rightarrow J_{\pm}|a,b\rangle$ es auto-est. de J_z con autovalor $b \pm \hbar$.

$$J^2(J_{\pm}|a,b\rangle) = J_{\pm}J^2|a,b\rangle = a(J_{\pm}|a,b\rangle)$$

$\Rightarrow$ ~~$J_{\pm}$~~ $J_{\pm}$ no muda a .

Autovalores de J_z e J^2

• J_+ sobre el autovalor de J_z ^(b) sin mudar autovalor de J^2 (a). $\circ$
 proceso no puede ser repetido indefinidamente, pois $a \geq b^2$, como
 vamos probar.

$$\begin{aligned} \text{Note que } J^2 - J_z^2 &= J_x J_x + J_y J_y = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \\ &= \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+) \end{aligned}$$

$$\langle a | J^2 - J_z^2 | a b \rangle \geq 0$$

$$= a - b^2 \geq 0 \Rightarrow \underline{a \geq b^2}$$

• Con a fijo, debe tener valor máximo $|b|$ ($= b_{\max}$) tal que

$$J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$$

$$\text{Tambi3n vale: } J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \text{mas } J_- J_+ &= \underbrace{J_x^2 + J_y^2} - i(J_y J_x - J_x J_y) \\ &= (J^2 - J_z^2) - \hbar J_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle = 0$$

NE es ket nulo.

$$\Rightarrow a - b_{\max}^2 - b_{\max} \hbar = 0$$

$$\Rightarrow a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$$

A rigor, isto deve ser provado; veja Cohen-Tannoudji Cap VI-2

- De forma similar, também deve haver $b_{\min}$ tal que

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0$$

Exercício $J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ e conclua que

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} a &= b_{\min}(b_{\min} + \hbar) \\ a &= b_{\max}(b_{\max} + \hbar) \end{aligned} \right\} \Rightarrow b_{\max} = -b_{\min} \Rightarrow -b_{\max} \leq b \leq b_{\max}$$

- Como cada "degrau" é de $\hbar$, $b_{\max} = b_{\min} + n\hbar$ (para algum inteiro n)

$$\Rightarrow b_{\max} = \frac{n\hbar}{2}$$

- Defina $j \equiv \frac{b_{\max}}{\hbar} \Rightarrow j = \frac{n}{2}$

- Valor máx. ~~de~~ do autovalor de J_z é $j\hbar$ (com j inteiro ou semi-inteiro)

- Como $a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) \Rightarrow a = \hbar^2 j(j+1)$

- Defina m tal que $b \equiv m\hbar$. Se $\left\{ \begin{array}{l} j \text{ inteiro, } \text{ todos os } m \text{ tb são} \\ j \text{ semi-int., } \text{ " " " "} \end{array} \right.$

$$\Rightarrow m \in \underbrace{\{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}}_{2j+1 \text{ valores}}$$

- Ao invés de usar $|a, b\rangle$, usa $|j, m\rangle$:

$$\begin{cases} J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases}$$

com $\left\{ \begin{array}{l} j \text{ inteiro ou semi-inteiro} \\ m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\} \end{array} \right.$

Elementos de matriz

$$\begin{cases} J^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle \end{cases}$$

J^2 :

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

J_z :

$$\langle j, m' | J_z | j, m \rangle = m \hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

$$\begin{aligned} \underline{J_{\pm}}: \quad \langle j, m | J_{\pm} J_{\pm} | j, m \rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z - \hbar J_z | j, m \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \end{aligned}$$

COMPARO:

Sei que $J_{\pm} |j, m\rangle = \underbrace{c_{jm}^{\pm}}_{\text{CTR}} |j, m \pm 1\rangle$

$$\Rightarrow |c_{jm}^{\pm}|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \hbar^2 (j-m)(j+m+1)$$

CONVENÇÃO: $c_{jm}^{\pm}$ real, > 0 .

$$\Rightarrow |J_{+} |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle$$

• De forma similar:

$$|J_{-} |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar |j, m-1\rangle$$

$$\Rightarrow \langle j, m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}$$

Representação da op. de rotações

- Vimos que $D_{\hat{n}}(\phi) = \exp\left(-i \frac{\vec{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right)$ é o operador de rotações de ϕ em torno do eixo $\hat{n}$. $\vec{J}$ é o op. de momento angular. Tanto $\vec{J}$ como $D_{\hat{n}}(\phi)$ são definidos para qualquer espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.
- Now tarefa agora é encontrar a representação matricial explícita para $\vec{J}$ e $D_{\hat{n}}(\phi)$, usando uma base conveniente para $\mathcal{H}$.
- Base conveniente: $\{|j, m\rangle\}$

~~Definição~~ • Elementos da matriz:

$$D_{j'm'm'}^{(j)}(R) = \langle j' m' | \exp\left(-i \frac{\vec{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) | j m \rangle$$

- Repare que os elementos entre $\langle j' m' |$ e $| j m \rangle$ são iguais a zero se $j' \neq j$.

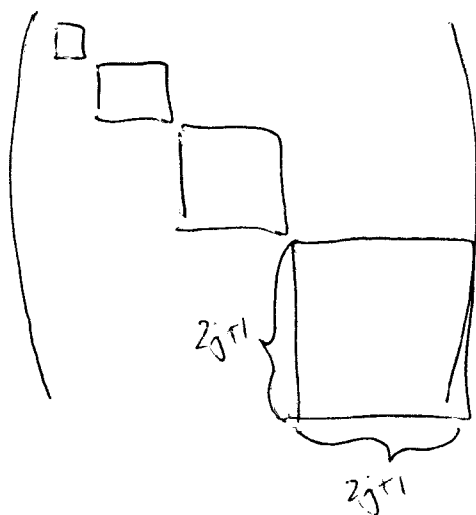
$$\text{Isso acontece pois } \underbrace{J^2(D(R)|j m \rangle)}_{= j(j+1)\hbar^2(D(R)|j m \rangle)} = D(R) J^2 |j m \rangle \quad (\text{pois } J^2 \text{ comuta com } J_K)$$

$\Rightarrow$ Rotações não mudam autovalor de J^2 .

- Podemos trabalhar com $\mathcal{H}$ consistindo de 2 (ou mais) subespaços, e ~~para~~ dinâmica capta de ~~o~~ mudar j de cada subespaço. Nesse caso, usando uma base arbitrária temos uma representação p/ $D(R)$ em geral complicada. A situação é simplificada se escolhermos ~~a base~~ a base $|j m\rangle$ ~~do sistema composto~~ do sistema composto.

Nesse caso uma rotação geral será escrita como uma matriz

diagonal por blocos:



Na literatura, cada bloco $(2j+1) \times (2j+1)$ é chamado de representação irredutível da op. de rotações $D(R)$.

Irredutível: cada bloco não pode ser escrito como subbloco menor com ~~base~~ ^{base} de base.

~~representação irredutível~~

• As matrizes de rotações ~~com j fixo~~ (com j fixo) formam um grupo.

• Identidade = $\mathbb{1}$ (no rotação)

• Inverso = inverte $\phi \rightarrow -\phi$ (com mesmo eixo $\hat{n}$)

• Fechada (composição de rotações)

• A matriz $D(R)$ é unitária: $D_{mm'}(R^{-1}) = D_{m'm}^*(R)$.

$$\begin{aligned} \text{Veja: } \langle j m' | \exp(-i \frac{\hat{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}) | j m \rangle &\xrightarrow{\phi \rightarrow -\phi} \langle j m' | \exp(+i \frac{\hat{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}) | j m \rangle = D_{m'm}(R^{-1}) \\ &= \langle j m | \exp(-i \frac{\hat{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}) | j m' \rangle^* = D_{m m'}^*(R) \end{aligned}$$

• A matriz de rotações nos ajuda a resolver problemas físicos. Imagine começar com estado $|j m\rangle$, e agora rota-lo:

$|j m\rangle \rightarrow D(R)|j m\rangle$ ← vimos que j não muda, mas os valores de m podem mudar. Como calcular as amplitudes de probabilidade dos resultados possíveis?

- Expando o resultado na base $\{|j, m\rangle\}$:

$$\underset{\substack{\uparrow \\ 11}}{D(R)}|j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m'| D(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(R)$$

→ o elemento de matriz $D_{m'm}^{(j)}(R)$ é a amplitude de probabilidade de medirmos $|j, m'\rangle$ depois de rotarmos (partindo de $|j, m\rangle$).

Calculando $D(R)$ gerais

- Da mecânica clássica, sabemos que qualquer rotação pode ser decomposta em seq. de 3 rotações (pelos ângulos de Euler):

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

- Então a matriz de rotação mais geral será:

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | \exp(-i \frac{J_z \alpha}{\hbar}) \exp(-i \frac{J_y \beta}{\hbar}) \exp(-i \frac{J_z \gamma}{\hbar}) | j, m \rangle \\ &= e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \underbrace{\langle j, m' | \exp(-i \frac{J_y \beta}{\hbar}) | j, m \rangle}_{\text{única parte que "mistura" m's diferentes}} \\ &\equiv D_{m'm}^{(j)}(\beta) \end{aligned}$$

• Spin 1/2 $\exp(-i \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \beta}{2}) = \left[1 - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2}{2!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^2 + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^4}{4!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^4 - \dots \right]$

$$\sigma_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$-i \left[(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \left(\frac{\beta}{2}\right) - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^3}{3!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^3 + \dots \right] \quad \text{Mas } (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^4 = 1 \text{ sempre}$$

$\left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{n}}{2} \right) \text{ nem sempre}$

$$= 1 \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \exp(-i \frac{\sigma_y \beta}{2}) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\beta}{2}) & -\sin(\frac{\beta}{2}) \\ \sin(\frac{\beta}{2}) & \cos(\frac{\beta}{2}) \end{pmatrix} \quad \left[\text{pois } \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right]$$

• $j=1$

• A primeira coisa de que precisamos é a representação 3×3 de J_y .

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y \Rightarrow J_y = \frac{(J_+ - J_-)}{2i}$$

• Conhecemos os elementos de matriz de $J_{\pm}$.

$$\langle j' m' | J_{\pm} | j m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1}$$

$\Rightarrow$ conhecemos os elementos de matriz de J_y .

$$J_y^{(j=1)} = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{matrix}$$

$m=1 \quad m=0 \quad m=-1$

• Agora precisamos da expansão em série de $\exp\left(-i \frac{J_y \beta}{\hbar}\right)$.

• $\left(J_y^{(j=1)}\right)^2 \neq \mathbb{1}$, cuidado! Mas é fácil de verificar que

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}$$

• Usando isso, podemos mostrar que $\exp\left(-i \frac{J_y \beta}{\hbar}\right) = 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos \beta)$

$$\left[\text{vale para } j=1 \right] \exp\left(-i \left(\frac{J_y}{\hbar}\right) \beta\right)$$

• Explicitamente:

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\beta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & \frac{1-\cos\beta}{2} \\ \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta \\ \frac{1-\cos\beta}{2} & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos\beta}{2} \end{pmatrix}$$

Momento angular orbital

- Se não temos spin, uma partícula ~~de~~ ainda pode ter momento angular orbital

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

- Primeiramente, vamos verificar que $\vec{L}$ acima satisfaz as ~~relações~~ relações de comutação fundamentais do momento angular:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] = [y p_z, z p_x] + [z p_y, x p_z] \\ &= y p_x [p_z, z] + p_y x [z, p_z] \\ &= i\hbar (x p_y - y p_x) = \underline{i\hbar L_z} \end{aligned}$$

- e de forma similar para os outros comutantes, mostramos que

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar L_k //$$

- Agora vamos ver se $1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(x p_y - y p_x)$ corresponde a uma rotação infinitesimal em torno do eixo z :

$$\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right] |x', y', z'\rangle = \left[1 - i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x') + i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right] |x', y', z'\rangle$$

usamos que p_j é gerador de translação

$$= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle \quad \text{é o que esperamos de rotação infinitesimal em torno de } \hat{z}?$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\delta\phi \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - \delta\phi y \\ y + \delta\phi x \end{pmatrix} \leftarrow \underline{\text{SIM}}$$

$\Rightarrow$ como $\vec{p}$ gera translações, $\vec{L}$ gera rotações.

• Considere função de onda de partícula em spin: $\langle x', y', z' | \alpha \rangle$. Após rotações infinitesimal em torno de $\hat{z}$, temos:

$$\begin{aligned} \langle x', y', z' | \alpha \rangle &\rightarrow \langle x', y', z' | [1 - i(\frac{\delta\phi}{\hbar}) L_z] | \alpha \rangle \\ &= \langle x' + y' \delta\phi, y' - x' \delta\phi, z' | \alpha \rangle \quad \textcircled{I} \end{aligned} \quad \left[\begin{array}{l} \text{Repare na diferença no} \\ \text{nivel por estamos} \\ \text{aplicando rotações no bra.} \end{array} \right]$$

• A mesma rotação fica mais transparente em coord. esféricas:

$$\begin{aligned} \langle n, \theta, \phi | \alpha \rangle &\rightarrow \langle n, \theta, \phi | [1 - i(\frac{\delta\phi}{\hbar}) L_z] | \alpha \rangle \quad \textcircled{II} \\ &= \langle n, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle \quad \left[\begin{array}{l} \text{vendo } \textcircled{I} \text{ acima, coord. mudam com rotações} \\ \text{de } -\delta\phi. \end{array} \right] \\ &= \langle n, \theta, \phi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \langle n, \theta, \phi | \alpha \rangle \quad \textcircled{III} \end{aligned}$$

• Compare II e III acima: $\langle \vec{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$

• Vamos considerar rotações de $\delta\phi_x$ em torno do eixo $\hat{x}$:

$$\langle x', y', z' | [1 - i(\frac{\delta\phi_x}{\hbar}) L_x] | \alpha \rangle = \langle x', y' + z' \delta\phi_x, z' - y' \delta\phi_x | \alpha \rangle$$

Escrevendo x', y', z' em coord. esféricas, pode-se mostrar que

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | L_x | \alpha \rangle &= -i\hbar \left(-\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle \quad \text{e} \\ \langle \vec{x}' | L_y | \alpha \rangle &= -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle \end{aligned}$$

e como $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$: $\Rightarrow \langle \vec{x}' | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$

• Também temos que $L^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+ L_- + L_- L_+)$

$$\Rightarrow \langle \vec{x}' | L^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$$

$\uparrow$ Parece parte angular de ∇^2 em coord. esféricas. Por quê?
Veja Sakurai, p. 197/198.

Harmônicos esféricos

- Quando partícula sem spin em potencial esféricamente simétrico. A eq. de onda é separável em coord. esféricas, e as autofunções de energia podem ser escritas:

$$\langle \vec{r} | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \text{ onde } n \text{ é outro número inteiro diferente de } l \text{ e } m(l^2) \text{ e } m(l).$$

- A simetria esférica garante que

$$[H, L^2] = [H, L_z] = 0 \Rightarrow \text{auto-est. de energia são também auto-estados de } L^2 \text{ e } L_z.$$

- A parte angular da função de onda é comum a todos os problemas com simetria esférica, por isso vamos estudá-la:

$$\langle \hat{n} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{n}) \text{ onde } \hat{n} \text{ é o vetor unitário na direção especificada por } \theta, \phi.$$

- $Y_l^m(\theta, \phi)$ é a amplitude associada à probabilidade de encontrarmos a partícula na direção θ, ϕ — ela será modulada pela função radial $R_{nl}(r)$, que dependerá do problema $[V(r)]$.

- Relações envolvendo auto-estados de $\{L^2, L_z\}$ podem ser escritas como relações envolvendo os harmônicos esféricos. Por exemplo:

$$L_z |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle \quad \left[\text{ou } \langle \hat{n} | \text{ e usando } \langle \vec{r} | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \vec{r} | \alpha \rangle \right]$$

$$\Rightarrow \langle \hat{n} | L_z | lm \rangle = m\hbar \langle \hat{n} | lm \rangle \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \underbrace{\langle \hat{n} | lm \rangle}_{Y_l^m(\theta, \phi)} = m\hbar \underbrace{\langle \hat{n} | lm \rangle}_{Y_l^m(\theta, \phi)}$$

$$\Rightarrow \text{a dependência em } \phi \text{ de } Y_l^m(\theta, \phi) \sim e^{im\phi}.$$

• Outra eq. satisfeita pelos $Y_l^m(\theta, \phi)$:

$$\langle \hat{n} | L^2 | l, m \rangle = \langle \hat{n} | l(l+1)\hbar^2 | l, m \rangle \Rightarrow \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + l(l+1) \right] Y_l^m = 0$$

que é a eq. diferencial satisfeita pelos $Y_l^m(\theta, \phi)$.

• A ortogonalidade dos auto-estados $\langle l, m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$ nos

$$\text{dá: } \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) (Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi))^* Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (\text{I})$$

• Uma forma de obter Y_l^m é começar com $m=l$: $\langle \hat{n} | L_+ | l, l \rangle = 0$

$$\Rightarrow -i\hbar e^{i\phi} \left[i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right] \langle \hat{n} | l, l \rangle = 0$$

Como a dependência com ϕ é $e^{il\phi}$, é fácil ver que a eq. é satisfeita por

$$\langle \hat{n} | l, l \rangle = Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} (\sin\theta)^l \text{ com}$$

$$c_l = \left[\frac{(-1)^l}{2^l l!} \right] \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \leftarrow \text{determinada pela normalização (I) acima.}$$

• Partindo de Y_l^l podemos encontrar Y_l^{m-1} aplicando o op. L_- a Y_l^l , e assim sucessivamente. A derivação é tediosa e se encontra em livros-texto elementares. O resultado p/ $m \geq 0$ é:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l}$$

$$\text{e } Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*$$

• A dependência com θ de $Y_l^m(\theta, \phi)$ é $(\sin\theta)^{|m|}$ [polinômio de grau $l-|m|$ de $\cos\theta$]

• Para $m=0 \Rightarrow Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$ polinômios de Legendre.

• Por que l n5 pode ser semi-inteiro?

- A funç5 de onda ~~de~~ ganharia uma fase de -1 depois de rotaç5 de 2π :

$$e^{im(2\pi)} = -1 \leftarrow \text{qual seria a f5. const, } \psi(x) \text{ ou } -\psi(x)?$$

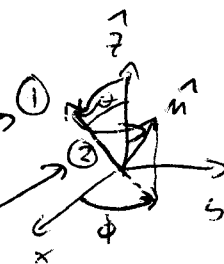
$\Rightarrow 2$ valores $\Rightarrow$ causa problemas.

- Outra raz5: pode-se mostrar que a eq diferencial p/ $Y_l^m(\theta, \phi)$ tem um conj completo de soluç5 p/ l inteiro $\Rightarrow$ os valores semi-inteiros n5 diferenci5veis.

Harm5nicos esf5ricos como matrizes de rotaç5

• Queremos achar $D(R)$ tal que $|\hat{n}\rangle = D(R)|\hat{z}\rangle$

• Rota cada $|\hat{z}\rangle$ em torno do eixo y por 5ng. θ ①
e em torno do eixo z por 5ng. ϕ ②



$$\Rightarrow D(R) = R_z(\phi) R_y(\theta)$$

• Escreva $|\hat{n}\rangle = D(R)|\hat{z}\rangle = \sum_l \sum_m D(R) |l, m\rangle \langle l, m|\hat{z}\rangle$ $[\langle l, m |]$

$$\Rightarrow \langle l, m|\hat{n}\rangle = \sum_m D_{lm}^{(R)}(\alpha=\phi, \beta=\theta) \langle l, m|\hat{z}\rangle$$

$\langle l, m|\hat{z}\rangle = Y_l^m(\theta=0, \phi)$ Sino [propriedade das Y_l^m : $Y_l^m(\theta=0) = 0$ se $m \neq 0$]

$$= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \Big|_{\theta=0} S_{m0}$$

$$= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} S_{m0}$$

analogi...

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} D_{m0}^{(l)}(\alpha=\phi, \beta=\theta)$$

$$\Leftrightarrow D_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)!}} Y_l^m(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha}$$

- As matrizes de rotação são relacionadas aos harmônicos esféricos assim.

Adição de momento angular

- Na física clássica, se queremos somar 2 grandezas com dimensão de momento angular, basta fazer a soma vetorial.
- Na MQ temos que aprender a construir os novos operadores $\vec{J}$ do sistema composto, e aprender ^{sobre} a relação entre as propriedades do sist. composto e de cada sub-sistema. Para isso, será muito útil o conceito de mudança de base, que estudamos no início do curso.

2 Exemplos simples

A - Partícula de spin $\frac{1}{2}$ e posição/momento

- Base: produto tensorial de ket em $\mathcal{H}$ de dimensão infinita $\{|\vec{x}'\rangle\}$
com ket em $\mathcal{H}$ de 2 dimensões $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

$$\Rightarrow |\vec{x}', \pm\rangle = |\vec{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle$$

- Qualquer operador que age só em $\{|\vec{x}'\rangle\}$ comuta com operadores de spin $\{| \pm \rangle\}$.

$$\begin{aligned} \text{• Rotações: } \exp\left(-i \frac{\vec{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) \quad \text{com } \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \\ &= \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S} \end{aligned}$$

$$\text{com } [\vec{L}, \vec{S}] = 0 \Rightarrow D(R) = \exp\left(-i \frac{\vec{L} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(-i \frac{\vec{S} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right)$$

- A função de onda tem 2 componentes:

$$\langle \vec{x}', \pm | \alpha \rangle = \psi_{\pm}(\vec{x}'), \text{ muitas vezes organizados em vetor-coluna.}$$

$$|\psi_{\pm}(\vec{x}')|^2 \text{ é a } \frac{\text{densidade de}}{\text{probabilidade}} \text{ da partícula ser medida em } \vec{x}' \text{ com spin } \pm.$$
$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}') \\ \psi_-(\vec{x}') \end{pmatrix}.$$

- Ao invés da base $\{|s'\rangle \otimes | \pm \rangle\}$, podemos expandir na base $\{|m \ m\rangle \otimes | \pm \rangle\}$. Veremos que outra alternativa seria a base dos $\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
 $L^2 \quad L_z \quad S^2, S_z$
 operadores $(\vec{J}^2, \vec{J}_z), L^2, S^2$: momento angular total.

B - 2 partículas de spin $\pm \frac{1}{2}$, sem levar em conta posições.

$$\vec{S} = \vec{S}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}_2 = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

- Op. de spins diferentes comutam: $[\vec{S}_{1i}, \vec{S}_{2j}] = 0$

- Op. do mesmo spin têm as relações de comutação que já estudamos:

$$[S_{ix}, S_{iy}] = i\hbar S_{iz} \text{ etc. como consequência,}$$

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \text{ onde os ops. } \frac{\hbar}{2} \text{ do spin total.}$$

- Vamos convenções ~~as relações~~ ~~as~~ os mínimos quânticos dos diversos operadores:

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 \quad \text{OPERADOR} \quad \longleftrightarrow \quad S(S+1)\hbar^2 \quad \text{AUTOVALOR}$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} \quad \longleftrightarrow \quad m\hbar$$

$$S_{1z} \quad \longleftrightarrow \quad m_1\hbar$$

$$S_{2z} \quad \longrightarrow \quad m_2\hbar$$

- De novo, temos 2 exallas de base:

- ① Representa $\{m_1, m_2\}$ em termos de auto-estados de S_{1z} e S_{2z} :

$$\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\} \quad \text{etc.} \quad |+-\rangle = |m_1 = +\frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2}\rangle$$

② Representação $\{S, m\}$ baseada nos autovetores de S^2 e S_z :

$$\left\{ \underbrace{|S=1, m=\pm 1, 0\rangle}_{\text{TRIPLET DE ESTADOS}}, \underbrace{|S=0, m=0\rangle}_{\text{ESTADO SINGLET}} \right\}$$

Em cada caso temos 4 vetores $\Rightarrow$ a dimensão do espaço de Hilbert.

• A relação entre as bases e^- :

$$|S=1, m=1\rangle = |++\rangle \quad (a)$$

$$|S=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (b)$$

$$|S=1, m=-1\rangle = |--\rangle \quad (c)$$

$$|S=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (d)$$

• Obtemos (b) de (a) usando o op. escada $S_- \equiv S_{1-} + S_{2-}$

$$= (S_{1x} - iS_{1y}) + (S_{2x} - iS_{2y})$$

- lembre que S_{1-} só afeta o 1º termo de $|++\rangle$, etc.

$$S_- |S=1, m=1\rangle = (S_{1-} + S_{2-})|++\rangle$$

$$\sqrt{(1+1)(1-1+1)} |S=1, m=0\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)} |+-\rangle + \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)} |-+\rangle$$

$\Rightarrow$ (b).

• (c) é obtido do (b) de forma similar, e (d) é obtido da relação de ortogonalidade com os outros 3.

• Os coeficientes aqui são conhecidos como coeficientes de Clebsch-Gordan - são os elementos da matriz de transformação entre as bases $\{m_1, m_2\}$ e $\{S, m\}$.

Teoria formal da adição de momento angular

- Considere 2 op. de momento angular em sub-sistemas diferentes, $\vec{J}_1$ e $\vec{J}_2$:

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{1k} \quad , \quad [J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{2k}.$$

- Ops. de int. diferentes comutam:

$$[J_{1K}, J_{2L}] = 0$$

- O op. de rotações infinitesimal nos 2 int. é:

$$\left(1 - \frac{i \vec{J}_1 \cdot \hat{n} \delta\phi}{\hbar}\right) \otimes \left(1 - \frac{i \vec{J}_2 \cdot \hat{n} \delta\phi}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i (\vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2) \cdot \hat{n} \delta\phi}{\hbar} \quad \textcircled{I}$$

$$[+ O(\delta\phi)^2]$$

- Definimos o momento angular total $\vec{J} \equiv \vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2$

$$= \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

- A versão finita da rotações acima é:

$$D_1(R) \otimes D_2(R) = \exp\left(-\frac{i \vec{J}_1 \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(-\frac{i \vec{J}_2 \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) \quad \textcircled{II}$$

- Repare de $\textcircled{I}$ acima que $\vec{J}$ é o gerador das rotações no int. total
 $\Rightarrow$ deve ser momento angular. De fato, é fácil verificar que

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

- Podemos descrever este sistema composto ~~em~~ ^{em} 2 bases diferentes:

OPC A: $\left\{ \overset{J_1^2}{\downarrow} \overset{J_2^2}{\downarrow} \overset{J_z}{\downarrow} \overset{J_{z^2}}{\downarrow} |j_1 j_2; m_1, m_2\rangle \right\} \leftarrow \text{todos comutam.}$
 $\leftarrow \text{"base local"}$

As equações de autovalores/vetores sã:

$$J_1^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

$$J_{1z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_1 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

$$J_2^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

$$J_{2z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_2 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

OPC B: $\left\{ \overset{J_1^2}{\downarrow} \overset{J_2^2}{\downarrow} \overset{J^2}{\downarrow} \overset{J_z}{\downarrow} |j_1 j_2; j, m\rangle \right\}$, frequentemente escrito $\{|j, m\rangle\}$
 $\leftarrow \text{todos comutam}$
 $\leftarrow \text{"base global"}$ (se j_1 e j_2 sã conhecidos e fixos)

- $[J^2, J_{1z}] \neq 0, [J^2, J_{2z}] \neq 0 \Rightarrow$ nã dá para adicionar J^2 ao conjunto de op. que definem a OPC A.
NEM para adicionar J_{1z} ou J_{2z} ao conjunto da OPC B.

• Vamos considerar o unitário que leva a base A para B:

$$U |j_1 j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \times \underbrace{ \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle }_{\text{U no espaço com } j_1, j_2 \text{ fixos.}}$$

~~escrito explicitamente~~ $\leftarrow \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$

$$= \sum_{m_1 m_2} \underbrace{ \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle }_{\text{elementos da matriz}} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

unitária de mudança de base

= COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN

Propriedades dos coef. do CG:

① $m = m_1 + m_2$

Note que $(J_z - J_{z1} - J_{z2}) |j_1 j_2; j m\rangle = 0 \quad [\langle j_1 j_2 | m_1 m_2 |]$

$$\Rightarrow (m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle = 0 \quad \text{CQD.}$$

② Os coeficientes só são $\neq 0$ quando $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ 

A prova está na Apêndice B do SAKURAI. Vejamos que a contagem é consistente:

- Na base A (local), m_1 tem $2j_1 + 1$ valores e

$$m_2 \text{ tem } 2j_2 + 1 \text{ valores} \Rightarrow \dim(H) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

- Na base B (global), assumamos que  acima vale. Então (assumindo $j_1 \geq j_2$)

$$\dim(H) = \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

$\Rightarrow$ temos o mesmo número de vetores em cada base, o que é necessário.

③ Os coeficientes podem ser escolhidos, por conveniência, como reais.

[prova no complemento Bx do Cohen-Tannoudji]

• Consequência: $\langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$ (SIMÉTRICA)

• Matriz unitária e real e ortogonal: $M^T M = M M^T = 11$ (T = transposto)

AQUI USO
TAMBÉM A
SIMETRIA
DA MATRIZ

$$\Rightarrow \sum_{j, m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m \rangle = \sum_{m_1, m_2} S_{m_1 m'_1} S_{m_2 m'_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m' \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m m'}$$

(também podem ser vistos como consequência da ortogonalidade das bases)

Calculando coeficientes de CG (Clebsch-Gordan)

- Vamos encontrar uma relação de recorrência que permitirá calcular os coeficientes de CG.

$$J_{\pm} |j_1 j_2, j, m\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \left(\sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2| \right) |j_1 j_2, j, m\rangle$$

- Usa a ação conhecida dos ops. $J_{\pm}$ dos dois lados da equação:

$$\begin{cases} J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle \\ J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar |j, m-1\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar |j_1 j_2, j, m \pm 1\rangle$$

$$= \sum_{m_1 m_2} \left(\sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} \hbar |j_1 j_2, m_1 \pm 1, m_2\rangle + \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} \hbar |j_1 j_2, m_1, m_2 \pm 1\rangle \right)$$

$$\cdot \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, j, m \rangle$$

- Agora ~~multiplicamos~~ multiplicamos por $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 |$ (pela esquerda), e o

"sanduíche" elimina todos os termos do l.d., exceto

$$m_1 = m_1' \pm 1, m_2 = m_2' \quad (1^\circ \text{ termo do l.d.})$$

$$m_1 = m_1', m_2 = m_2' \pm 1 \quad (2^\circ \text{ termo do l.d.})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, j, m \pm 1 \rangle \\ & = \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \hbar \langle j_1 j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2, j, m \rangle \\ & + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \hbar \langle j_1 j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2, j, m \rangle \end{aligned}$$

Relações de recorrência
p/ coeficientes de
Clebsch-Gordan.

- Com essas relações é possível elaborar uma tabela de coeficientes de Clebsch-Gordan - veja o Sakurai, ref 3.7.

Operadores escalares e vetoriais [Cohn-Tannadji BvI]

- Operadores se transformam sob rotações:

$$A \rightarrow D(R) A D(R)^\dagger$$

- No caso de rotações infinitesimais:

$$A \rightarrow \left(1 - i \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \delta\phi\right) A \left(1 + i \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \delta\phi\right) = A - \frac{i}{\hbar} \delta\phi [\vec{J} \cdot \hat{n}, A]$$

- Operadores escalares são aqueles que não mudam com rotações

$$A \rightarrow A' \quad \text{mas acontece se } [\vec{J} \cdot \hat{n}, A] = 0$$

$\Rightarrow$ op. escalares comutam com os 3 componentes do momento angular.

$$\text{Ex: } J^2, \vec{R} \cdot \vec{P}, H.$$

Operadores vetoriais

- Um vetor em física clássica é uma quantidade com 3 componentes que se transforma sob rotações assim: $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$

- Em mecânica quântica, operadores vetoriais

$\vec{V}$ devem ter seus valores esperados transformados da mesma forma que vetores em física clássica.

$$\begin{aligned} \text{Como } |\alpha\rangle &\rightarrow D(R)|\alpha\rangle \Rightarrow \langle\alpha|V_i|\alpha\rangle \rightarrow \langle\alpha|D^\dagger(R)V_i D(R)|\alpha\rangle \\ &= \sum_j R_{ij} \langle\alpha|V_j|\alpha\rangle \end{aligned}$$

Como isso vale para qualquer $|\alpha\rangle$, operadores vetoriais são aqueles que satisfazem

$$D^\dagger(R)V_i D(R) = \sum_j R_{ij} V_j$$

matriz de rotações
3x3

• Vamos considerar rotações infinitesimais: $D(R) = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \vec{J} \cdot \hat{n}$

$$\Rightarrow D^\dagger(R) V_i D(R) = \underbrace{\left(1 + \frac{i\varepsilon \vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) V_i \left(1 - \frac{i\varepsilon \vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right)}_{V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_i, \vec{J} \cdot \hat{n}]} = \sum_j R_{ij}(\hat{n}, \varepsilon) V_j$$

No caso de $\hat{n} = \hat{z}$:

$$R(\hat{z}, \varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$x: V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y$$

$$y: V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] = \varepsilon V_x + V_y$$

$$z: V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] = V_z$$

$$\Rightarrow \begin{cases} [V_x, J_z] = -i\hbar V_y \\ [V_y, J_z] = i\hbar V_x \\ [V_z, J_z] = 0 \end{cases}$$

Considerando rotações infinitesimais em torno de $\hat{x}$ e $\hat{y}$ encontramos:

$$\boxed{[V_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k} \quad (\text{I})$$

• Podemos usar a propriedade (I) acima como a definição de operador vetorial.

• As relações de comutação de grandezas vetoriais ((I)) foram obtidas usando rotações infinitesimais, mas servem p/ determinar o comportamento de $\vec{V}$ sob rotações finitas:

$$\exp\left(\frac{i\vec{J}_j \phi}{\hbar}\right) V_i \exp\left(-\frac{i\vec{J}_j \phi}{\hbar}\right) \leftarrow \text{Usando BHE isso se reduz a calcular } [J_j, [J_j, \dots [J_j, V_i] \dots]]$$

onde cada comutador ~~é~~ é proporcional a V_i ou V_k ($k \neq i, j$).

- Todos os operadores vetoriais que coleamos ~~de~~ devem satisfazer (I):
 - $\vec{J}$: três (relações de comutação fundamentais do momento angular)
 - $[y, L_z] = i\hbar x$
 - $[x, L_z] = -i\hbar y$
 - $[p_x, L_z] = -i\hbar p_y$
 - $[p_y, L_z] = i\hbar p_x$

etc, como pode ser facilmente verificado.

Elementos de matriz de op. escalares e vetoriais

Escalares

- Vimos que ~~os~~ escalares comutam com J_x, J_y e J_z , e portanto também com J_+, J_-, J^2 .
- $$\Rightarrow \left(\begin{array}{l} \text{se } A \text{ é escalar} \\ A = a \mathbb{1} \end{array} \right) \Rightarrow \langle j'm' | A | j'm \rangle = \langle j'm' | a \mathbb{1} | j'm \rangle = a \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

ou seja, a maior parte dos elementos de matriz de A são 0

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix} \quad \text{blo}(2j+1) \times (2j+1)$$

- Isso é consequência do comportamento de A sob rotações. Vejamos agora o que podemos dizer dos elementos de matriz de operadores vetoriais.

Operadores vetoriais [Lévin-Tannoudgi D_x]

• Temos $J_{\pm} = J_x \pm i J_y$. Para um op. vetorial $\vec{V}$, definimos

$$V_{\pm} = V_x \pm i V_y$$

• Como $\vec{V}$ é vetorial, sei que: $[V_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$

$$\Rightarrow [J_x, V_{\pm}] = \underbrace{[J_x, V_x]}_0 \pm i \underbrace{[J_x, V_y]}_{-i\hbar V_z} = \mp \hbar V_z \text{ e similitudemente (I)}$$

$$[J_y, V_{\pm}] = -i\hbar V_z \quad \text{(II)}$$

$$[J_z, V_{\pm}] = \pm \hbar V_{\pm} \quad \text{(III)}$$

• Com essas relações de comutação, podemos calcular aqueles entre $J_{\pm}$ e $V_{\pm}$:

$$[J_+, V_+] = [J_x, V_+] + i [J_y, V_+] = 0 \quad \text{(IV)}$$

$-\hbar V_z + i \cdot (-i\hbar V_z)$

$$[J_+, V_-] = 2\hbar V_z \quad \text{(V)}$$

$$[J_-, V_+] = -2\hbar V_z \quad \text{(VI)}$$

$$[J_-, V_-] = 0 \quad \text{(VII)}$$

= • Vamos precisar deste teorema:

Se 2 observáveis comutam, e se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sã 2 autovetores de A com autovalores diferentes, então o elemento de matriz $\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0$.

Para: $A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$

$A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$

$A(B|\psi_2\rangle) = B(A|\psi_2\rangle) = a_2(B|\psi_2\rangle)$

$\Rightarrow B|\psi_2\rangle$ é autovetor de A com autovalor

$\Rightarrow B|\psi_2\rangle$ é $\propto |\psi_1\rangle$ a_2 .

$\Rightarrow \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0$

• Agora ^{VAMOS PROVAR} ~~provamos~~ que as relações de comutação que encontramos significam que vários elementos de matriz de $\vec{V}$ são nulos.

• $[V_z, J_z] = 0 \Rightarrow \langle j, m | V_z | j, m' \rangle = 0$ se $m \neq m'$.
(pelo teorema acima).

• Elementos de matriz de $V_{\pm}$:

Relações III, p. 32: $[J_z, V_{\pm}] = \pm \hbar V_{\pm} \Rightarrow J_z V_{\pm} = V_{\pm} J_z \pm \hbar V_{\pm} \quad [\cdot | j, m \rangle]$

$\Rightarrow J_z(V_{\pm} | j, m' \rangle) = V_{\pm} J_z | j, m' \rangle \pm \hbar V_{\pm} | j, m' \rangle$
 $= (m' \pm 1) \hbar (V_{\pm} | j, m' \rangle)$

$\Rightarrow V_{\pm} | j, m' \rangle$ é autovetor de J_z com autovalor $(m' \pm 1) \hbar$

$\Rightarrow \langle j, m | V_{\pm} | j, m' \rangle = 0$ se $m \neq m' \pm 1$

Resumindo: para elementos de $m \neq m'$ temos:

$$\underline{V_z} : \Delta m = m - m' = 0$$

$$\underline{V_+} : \Delta m = m - m' = +1$$

$$\underline{V_-} : \Delta m = m - m' = -1$$

REGRAS de SELEÇÃO

Para $V_z, V_{\pm}$.

$\Rightarrow$ em cada subespaço com j fixo ($\dim H = 2j+1$) temos que V_z é op. diagonal, e $V_{\pm}$ só tem elementos de $m \neq m'$ logo acima e abaixo da diagonal.