

FI 001 – Mecânica Quântica I – Lista 4

Soluções

Questão 01 — Simetrias de matriz do momento angular e paridade

(P.13.2, P.13.3 e P.13.4, Messiah)

Sejam $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ as componentes de um operador de momento angular (orbital $\mathbf{l}$ ou de spin $\mathbf{s}$), satisfazendo

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

Lembramos que, numa base de autovetores simultâneos de $\mathbf{J}^2$ e J_z (autoestados $|jm\rangle$ com fases na convenção de Condon–Shortley), a matriz J_z é real e diagonal, e as fases podem ser escolhidas de modo que J_x também seja real e simétrica. O item (a) parte dessa escolha de representação.

a) J_y é puramente imaginária (e anti-simétrica)

Utilizamos a relação de comutação entre as duas componentes dadas como reais:

$$[J_x, J_z] = i\hbar \varepsilon_{xzk} J_k = -i\hbar J_y,$$

pois $\varepsilon_{xzy} = -1$. No membro esquerdo, J_x e J_z são matrizes reais; o comutador de duas matrizes reais é uma matriz real. Logo $-i\hbar J_y$ é real, donde J_y é *puramente imaginária*:

$$J_y = iM, \quad M \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Como J_y é hermitiano ($J_y^\dagger = J_y$),

$$J_y^\dagger = (iM)^\dagger = -iM^\top \stackrel{!}{=} iM \implies M^\top = -M.$$

Portanto M é anti-simétrica, e $J_y = iM$ é *anti-simétrica*. (Anti-simetria segue também do fato de J_y ser puramente imaginária e hermitiana: sua diagonal deve ser nula, e $\overline{(J_y)_{ab}} = -(J_y)_{ba}$ implica $(J_y)_{ab} = -(J_y)_{ba}$.) $\square$

b) Comutar com duas componentes implica comutar com a terceira

Seja O um operador qualquer tal que

$$[O, J_x] = 0, \quad [O, J_y] = 0.$$

Escrevendo J_z em função do comutador das duas primeiras componentes,

$$J_z = \frac{1}{i\hbar} [J_x, J_y],$$

temos, pela identidade de Jacobi para o comutador duplo,

$$[O, J_z] = \frac{1}{i\hbar} [O, [J_x, J_y]] = \frac{1}{i\hbar} \left([[O, J_x], J_y] + [J_x, [O, J_y]] \right) = 0.$$

Logo O comuta também com a terceira componente. $\square$

c) Paridade e as harmônicas esféricas

Seja $\hat{\mathcal{P}}$ o operador de paridade (reflexão na origem). Na representação de coordenadas,

$$(\hat{\mathcal{P}}\psi)(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad \hat{\mathcal{P}}F(\theta, \varphi) = F(\pi - \theta, \varphi + \pi).$$

(i) $[\hat{\mathcal{P}}, \mathbf{l}] = 0$. O momento angular orbital é $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Sob paridade, $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ e $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow -\mathbf{p}$ (pois $\partial/\partial x_i \rightarrow -\partial/\partial x_i$). Assim,

$$\hat{\mathcal{P}}\mathbf{l}\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{r} \times \mathbf{p})\hat{\mathcal{P}}^{-1} = (-\mathbf{r}) \times (-\mathbf{p}) = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{l},$$

donde $[\hat{\mathcal{P}}, l_i] = 0$ para $i = x, y, z$. Em particular, $[\hat{\mathcal{P}}, \mathbf{l}^2] = 0$ e $[\hat{\mathcal{P}}, l_z] = 0$.

(ii) **A paridade de Y_{lm} é bem definida e depende só de l .** As harmônicas esféricas $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ são autofunções simultâneas de $\mathbf{l}^2$ e l_z . Como $\hat{\mathcal{P}}$ comuta com ambas, $\hat{\mathcal{P}}Y_{lm}$ é ainda autofunção de $\mathbf{l}^2$ com o mesmo l e de l_z com o mesmo m :

$$l_z(\hat{\mathcal{P}}Y_{lm}) = \hat{\mathcal{P}}(l_zY_{lm}) = m\hbar\hat{\mathcal{P}}Y_{lm}.$$

Dentro do autoespaço unidimensional de (l, m) , o operador $\hat{\mathcal{P}}$ age como uma constante; como ele comuta também com l_x, l_y , sua ação é proporcional à identidade no subespaço irredutível de índice l . Portanto existe um escalar c_l (dependente apenas de l) tal que

$$\hat{\mathcal{P}}Y_{lm} = c_l Y_{lm}, \quad c_l = \pm 1.$$

(iii) **Determinação de c_l .** Basta calcular num estado de peso máximo, $m = l$:

$$Y_l^l(\theta, \varphi) \propto (\sin \theta)^l e^{il\varphi}$$

(a menos de normalização). Pela definição de paridade,

$$\hat{\mathcal{P}}Y_l^l = Y_l^l(\pi - \theta, \varphi + \pi) \propto [\sin(\pi - \theta)]^l e^{il(\varphi + \pi)} = (\sin \theta)^l e^{il\varphi} e^{il\pi} = (-1)^l Y_l^l(\theta, \varphi).$$

Assim $c_l = (-1)^l$. Concluimos que

$$\boxed{\hat{\mathcal{P}}Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}}$$

para todo m : as harmônicas esféricas têm paridade bem definida, $(-1)^l$, dependendo *somente* do número quântico l (par para l par, ímpar para l ímpar).

Observação (sugestão do enunciado). Definindo as componentes do vetor unitário $\hat{\mathbf{n}} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ por $F_1 = \sin \theta \cos \varphi$, $F_2 = \sin \theta \sin \varphi$, $F_3 = \cos \theta$, vale $l_i F_j = i\hbar \varepsilon_{ijk} F_k$ e, sob paridade, $F_j(\pi - \theta, \varphi + \pi) = -F_j(\theta, \varphi)$, isto é, $\hat{\mathcal{P}}F_j = -F_j$ (paridade ímpar, coerente com $l = 1$ e $c_1 = -1$). A paridade geral $(-1)^l$ segue de Y_{lm} ser combinação homogênea de grau l nessas componentes cartesianas. $\square$

Questão 02 — Matrizes de momento angular para $j = 1/2, 1, 3/2$

(P.11.3, Merzbacher)

Para um operador de momento angular $\mathbf{J}$ com autovalor total j , a representação na base $|jm\rangle$ ($m = -j, -j+1, \dots, j$) é dada pelos elementos de matriz padrão

$$\begin{aligned}\langle jm'|J_z|jm\rangle &= m\hbar \delta_{m'm}, \\ \langle jm'|J_{\pm}|jm\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \delta_{m', m\pm 1}, \quad J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y, \\ J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-).\end{aligned}$$

O índice de linha é m' e o de coluna é m . Calculamos abaixo as três matrizes pedidas (em unidades de $\hbar$; para recuperar as dimensões, multiplique cada entrada por $\hbar$).

$j = 1/2$ (base $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$)

Os fatores de escalonamento: para $j_{\pm}|jm\rangle$, a raiz é $\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}$. Com $j = \frac{1}{2}$, $J_+|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ e $J_-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$. Assim

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

e portanto

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Estas são as matrizes de Pauli $\frac{\hbar}{2}\sigma_i$. □

$j = 1$ (base $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$)

Raízes: $\langle 1, 0|J_+|1, -1\rangle = \hbar\sqrt{1(2) - (-1)(0)} = \sqrt{2}\hbar$; $\langle 1, 1|J_+|1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2-0} = \sqrt{2}\hbar$; análogas para J_- .

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Verificação: $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ etc. satisfeitas. □

$j = 3/2$ (base $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$)

Coeficientes de escalonamento $\langle j, m\pm 1|J_{\pm}|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}$ com $j = \frac{3}{2}$ ($j(j+1) = \frac{15}{4}$):

$$\begin{aligned}m = \frac{3}{2} : \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{9}{4}} &= \sqrt{\frac{6}{2}} = ? & (\text{não há } m+1); \\ m = \frac{1}{2} : \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{4}} &= \sqrt{\frac{14}{4}} = \sqrt{\frac{7}{2}} & \text{ para } J_+, \quad \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{4}} = \sqrt{3} \text{ para } J_-; \\ m = -\frac{1}{2} : \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{4}} &= \sqrt{3} \text{ para } J_+, \quad \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{4}} = \sqrt{\frac{7}{2}} \text{ para } J_-; \\ m = -\frac{3}{2} : \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{9}{4}} &= \sqrt{\frac{6}{4}} = \sqrt{\frac{3}{2}} & \text{ para } J_-.\end{aligned}$$

(As raízes acima usam $m(m+1)$ para J_+ e $m(m-1)$ para J_- ; reorganizando na ordem canônica das linhas/colunas obtém-se:)

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}.$$

Portanto

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}.$$

Estas matrizes comutam segundo $[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$ e satisfazem $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{15}{4}\hbar^2 \mathbb{1}$, confirmando que representam $j = 3/2$. $\square$

Questão 03 — Operadores vetoriais

(Ex. 16.5, Merzbacher; P.7.3, Ballentine; P.4.3, Weinberg)

Um operador vetorial $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ (com $V_i \equiv V_{x_i}$) é definido pela relação de comutação com as componentes do momento angular

$$[J_i, V_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k, \quad (1)$$

onde repetição de índice implica soma. Esta é a condição de transformação sob rotações infinitesimais: $\mathbf{V}$ “gira como um vetor”.

a) V_z diagonal $\Rightarrow J_z$ diagonal

Da relação (1) com $i = j = z$,

$$[J_z, V_z] = i\hbar \varepsilon_{zzk} V_k = 0,$$

pois $\varepsilon_{zzk} = 0$. Logo J_z e V_z comutam e, portanto, são simultaneamente diagonalizáveis.

Considere a base em que V_z é diagonal, $V_z |a\rangle = v_a |a\rangle$. Pela comutação acima,

$$\langle a | [J_z, V_z] | b \rangle = (v_a - v_b) \langle a | J_z | b \rangle = 0,$$

donde $\langle a | J_z | b \rangle = 0$ para $v_a \neq v_b$: J_z é diagonal por blocos nos autoespaços de V_z . Como J_z e V_z comutam, podemos, dentro de cada autoespaço degenerado de V_z , escolher a base de modo a diagonalizar também J_z , sem estragar a forma diagonal de V_z . Conclui-se que a base pode ser escolhida de modo que ambas V_z e J_z sejam diagonais; em particular, na base em que um componente z de operador vetorial é diagonal, J_z também o é.

Recíproca. O mesmo argumento mostra o enunciado parcial: se J_z é diagonal, então a componente z de qualquer operador vetorial é diagonal, pois $[J_z, V_z] = 0$ força $\langle jm | V_z | jm' \rangle \propto \delta_{mm'}$. $\square$

b) $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ comuta com J_x, J_y, J_z

Sejam $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ operadores vetoriais, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_k B_k$. Usando (1) para ambos,

$$\begin{aligned} [J_i, A_k B_k] &= [J_i, A_k] B_k + A_k [J_i, B_k] \\ &= i\hbar \varepsilon_{ik\ell} A_\ell B_k + i\hbar A_k \varepsilon_{ik\ell} B_\ell. \end{aligned}$$

No primeiro termo, reescrevemos $\varepsilon_{ik\ell} = -\varepsilon_{i\ell k}$ e renomeamos $\ell \leftrightarrow j$: $i\hbar \varepsilon_{ik\ell} A_\ell B_k = -i\hbar \varepsilon_{ijk} A_j B_k$. No segundo, renomeamos $k \rightarrow j$, $\ell \rightarrow k$: $i\hbar A_k \varepsilon_{ik\ell} B_\ell = +i\hbar \varepsilon_{ijk} A_j B_k$. Os dois termos se cancelam exatamente:

$$[J_i, \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}] = 0, \quad i = x, y, z.$$

Portanto o produto escalar de dois operadores vetoriais é um *escalar* (operador escalar), invariante sob rotações. $\square$

c) $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ é um operador vetorial

Definimos a componente m do produto vetorial de operadores por

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_m = \varepsilon_{mjk} A_j B_k.$$

Calculamos seu comutador com J_i :

$$\begin{aligned} [J_i, (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_m] &= \varepsilon_{mjk} [J_i, A_j B_k] \\ &= \varepsilon_{mjk} ([J_i, A_j] B_k + A_j [J_i, B_k]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{mjk} \varepsilon_{ijk\ell} \text{ não } \dots \end{aligned}$$

Mais explicitamente, usando (1),

$$[J_i, (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_m] = i\hbar \varepsilon_{mjk} \varepsilon_{ijp} A_p B_k + i\hbar \varepsilon_{mjk} \varepsilon_{ikq} A_j B_q. \quad (2)$$

Contraindo as tensões de Levi-Civita com a identidade $\varepsilon_{abc} \varepsilon_{ade} = \delta_{bd} \delta_{ce} - \delta_{be} \delta_{cd}$:

$$\varepsilon_{mjk} \varepsilon_{ijp} = \delta_{mp} \delta_{ki} - \delta_{mi} \delta_{kp}, \quad \varepsilon_{mjk} \varepsilon_{ikq} = \delta_{mq} \delta_{ji} - \delta_{mi} \delta_{jq}.$$

Substituindo em (2),

$$\begin{aligned} [J_i, (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_m] &= i\hbar (\delta_{mp} \delta_{ki} - \delta_{mi} \delta_{kp}) A_p B_k + i\hbar (\delta_{mq} \delta_{ji} - \delta_{mi} \delta_{jq}) A_j B_q \\ &= i\hbar (\delta_{mi} A_k B_k - A_m B_i + A_i B_m - \delta_{mi} A_j B_j) \\ &= i\hbar (A_i B_m - A_m B_i). \end{aligned}$$

Por fim, expandindo o membro direito na definição de produto vetorial,

$$\varepsilon_{imn} (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_n = \varepsilon_{imn} \varepsilon_{nst} A_s B_t = (\delta_{is} \delta_{mt} - \delta_{it} \delta_{ms}) A_s B_t = A_i B_m - A_m B_i.$$

Portanto

$$\boxed{[J_i, (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_m] = i\hbar \varepsilon_{imn} (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_n},$$

isto é, $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ satisfaz exatamente a relação (1) e, assim, é um operador vetorial. □

Questão 04 — Rotações finitas, operadores vetoriais e matrizes de rotação

(Ex. 11.1 e Ex. 16.4, Merzbacher; P.26.3, Desai)

Seja $\hat{\mathbf{n}}$ um vetor unitário. A rotação finita de ângulo θ em torno de $\hat{\mathbf{n}}$ é representada pelo operador unitário

$$U_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}\right),$$

que atua em operadores por conjugação (transformação ativa): $B = UAU^\dagger$.

a) Fórmula de Rodrigues para rotações

Rotação em torno do eixo z . A matriz de rotação $R_z(\varphi)$ é

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para um vetor $\mathbf{r} = (x, y, z)$, a transformação $\mathbf{r}' = R_z(\varphi)\mathbf{r}$ dá

$$x' = x \cos \varphi - y \sin \varphi, \quad y' = x \sin \varphi + y \cos \varphi, \quad z' = z.$$

A diferença $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$ tem componentes

$$\begin{aligned} x' - x &= x(\cos \varphi - 1) - y \sin \varphi, \\ y' - y &= x \sin \varphi + y(\cos \varphi - 1), \\ z' - z &= 0. \end{aligned}$$

Agora calculamos o lado direito da identidade pedida. Como $\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r} = (-y, x, 0)$,

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r}) = \hat{\mathbf{z}} \times (-y, x, 0) = (-x, -y, 0).$$

Portanto

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r})(1 - \cos \varphi) + \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r} \sin \varphi = (-x, -y, 0)(1 - \cos \varphi) + (-y, x, 0) \sin \varphi,$$

cujas componentes são exatamente $(x' - x, y' - y, 0)$, provando

$$\boxed{\mathbf{r}' - \mathbf{r} = \hat{\mathbf{z}} \times (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r})(1 - \cos \varphi) + \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r} \sin \varphi}.$$

Rotação em torno de um eixo arbitrário $\hat{\mathbf{n}}$. A matriz de rotação em torno de $\hat{\mathbf{n}}$ por ângulo θ é a fórmula de Rodrigues:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) = \mathbb{1} \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}}^\top - \sin \theta [\hat{\mathbf{n}} \times],$$

onde $[\hat{\mathbf{n}} \times]$ é o tensor anti-simétrico com $([\hat{\mathbf{n}} \times] \mathbf{r})_i = \varepsilon_{ijk} n_j r_k = (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r})_i$. Aplicando a um vetor $\mathbf{r}$,

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \cos \theta + \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r})(1 - \cos \theta) + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) \sin \theta.$$

Subtraindo $\mathbf{r}$ e notando que $\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}) - \mathbf{r}$, obtemos

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r} = [\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}) - \mathbf{r}](1 - \cos \theta) + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) \sin \theta = \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r})(1 - \cos \theta) + \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r} \sin \theta,$$

como se queria demonstrar. □

b) Comutadores $[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}]$ e $[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}]$

A Eq. (16.42) de Merzbacher fornece o comutador de uma componente do momento angular com uma componente de operador vetorial:

$$[J_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k. \quad (16.42)$$

Primeiro comutador:

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}] = n_i n_j [J_i, A_j] = i\hbar n_i n_j \varepsilon_{ijk} A_k.$$

Como ε_{ijk} é anti-simétrico em i, j e $n_i n_j$ é simétrico, a contração se anula:

$$\boxed{[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}] = 0}.$$

(Intuitivamente: a componente de $\mathbf{A}$ paralela a $\hat{\mathbf{n}}$ não muda sob rotações em torno de $\hat{\mathbf{n}}$.)

Segundo comutador: A componente m de $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}$ é $(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_m = \varepsilon_{m\ell k} n_\ell A_k$. Logo

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_m] &= n_i \varepsilon_{m\ell k} [J_i, A_k] n_\ell \\ &= i\hbar n_i \varepsilon_{m\ell k} \varepsilon_{ijk} n_\ell A_j. \end{aligned}$$

Usando $\varepsilon_{m\ell k} \varepsilon_{ijk} = \delta_{mi} \delta_{\ell j} - \delta_{mj} \delta_{\ell i}$,

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_m] &= i\hbar n_i (\delta_{mi} \delta_{\ell j} - \delta_{mj} \delta_{\ell i}) n_\ell A_j \\ &= i\hbar (n_m n_j A_j - n_i n_m A_i) \\ &= i\hbar n_m (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - i\hbar n_m (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Assim

$$\boxed{[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}] = 0}.$$

(A componente de $\mathbf{A}$ perpendicular a $\hat{\mathbf{n}}$ *gira* no plano perpendicular, mas o *vetor* $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}$ não muda como operador; sua direção é fixa em relação a $\hat{\mathbf{n}}$.) $\square$

c) Rotação finita de um operador vetorial

Devemos verificar a fórmula de rotação finita

$$\exp(i\frac{\theta}{\hbar} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}) \mathbf{A} \exp(-i\frac{\theta}{\hbar} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}) = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}) \cos \theta + \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} \sin \theta. \quad (*)$$

Esta é a transformação ativa (conjugação por U). Expandimos o lado esquerdo como série de Baker–Campbell–Hausdorff (ou derivada paramétrica, técnica da Sec. 3.4 das notas de aula):

$$U(\theta) \mathbf{A} U^\dagger(\theta) = \mathbf{A} + \frac{i\theta}{\hbar} [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{A}] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^2 [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{A}]] + \dots$$

Calculamos os comutadores sucessivos. Pela regra de operador vetorial,

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, A_m] = i\hbar \varepsilon_{mik} n_i A_k = i\hbar (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_m.$$

Ou seja,

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{A}] = i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}. \quad (2)$$

Aplicando novamente,

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_m] &= i\hbar \varepsilon_{mik} n_i (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_k \\ &= i\hbar (\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}))_m. \end{aligned}$$

Mas, pela identidade do triplo produto vetorial, $\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}) = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}$, logo

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}] = i\hbar(\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}). \quad (3)$$

Uma terceira iteração dá

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}] &= i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}) \\ &= -i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} = -[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{A}], \end{aligned}$$

pois $\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}} = 0$. A série fecha em três iterações. Coletando os termos,

$$\begin{aligned} U\mathbf{A}U^\dagger &= \mathbf{A} + \frac{i\theta}{\hbar}(i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}) + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^2[i\hbar(\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A})] \\ &\quad + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^3[-i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}] + \frac{1}{4!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^4[-i\hbar(\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A})] + \dots \end{aligned}$$

Agrupando as séries de $\mathbf{A}$, $\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A})$ e $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}$:

$$\begin{aligned} \text{coef. de } \mathbf{A} : \quad & 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots = \cos \theta, \\ \text{coef. de } \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) : \quad & \frac{\theta^2}{2!} - \frac{\theta^4}{4!} + \dots = 1 - \cos \theta, \\ \text{coef. de } \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} : \quad & -\theta + \frac{\theta^3}{3!} - \dots = -\sin \theta. \end{aligned}$$

Assim

$$U\mathbf{A}U^\dagger = \mathbf{A} \cos \theta + \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A})(1 - \cos \theta) - \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} \sin \theta.$$

Reescrevendo $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})$, obtemos a forma pedida:

$$U\mathbf{A}U^\dagger = \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}) \cos \theta + \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} \sin \theta.$$

A Eq. (161.3) das Lecture Notes (rotação do vetor de posição) é o caso especial $\mathbf{A} = \mathbf{r}$ desta fórmula geral, coerente com as Eqs. (16.36) e (16.46) de Merzbacher. $\square$

d) Rotação de $\mathbf{A}$ para $\mathbf{B}$ com $\hat{\mathbf{n}} = (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$

Temos $B_i = U_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) A_i U_{\hat{\mathbf{n}}}^\dagger(\theta)$ com $\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$. Usando a fórmula (*) do item (c),

$$B_i = n_i(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - (\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}))_i \cos \theta + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_i \sin \theta.$$

Calculamos os produtos vetoriais necessários:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + A_y), \\ \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ 1 & 1 & 0 \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_z, -A_z, A_y - A_x), \\ \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}) &= \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A} = \frac{1}{2}(A_x + A_y - A_x, A_x + A_y - A_y, 0) - (0, 0, A_z) \\ &= \frac{1}{2}(A_y, A_x, 0) - (0, 0, A_z) = \left(\frac{A_y}{2}, \frac{A_x}{2}, -A_z\right). \end{aligned}$$

Agora montamos as componentes de $\mathbf{B}$:

Componente x :

$$\begin{aligned}
 B_x &= n_x(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - (\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}))_x \cos \theta + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_x \sin \theta \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x + A_y) - \frac{A_y}{2} \cos \theta + \frac{A_z}{\sqrt{2}} \sin \theta \\
 &= \frac{A_x + A_y}{2} - \frac{A_y}{2} \cos \theta + \frac{A_z}{\sqrt{2}} \sin \theta.
 \end{aligned}$$

Componente y :

$$\begin{aligned}
 B_y &= n_y(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - (\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}))_y \cos \theta + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_y \sin \theta \\
 &= \frac{A_x + A_y}{2} - \frac{A_x}{2} \cos \theta - \frac{A_z}{\sqrt{2}} \sin \theta.
 \end{aligned}$$

Componente z :

$$\begin{aligned}
 B_z &= n_z(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A}) - (\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}))_z \cos \theta + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A})_z \sin \theta \\
 &= 0 - (-A_z) \cos \theta + \frac{A_y - A_x}{\sqrt{2}} \sin \theta \\
 &= A_z \cos \theta + \frac{A_y - A_x}{\sqrt{2}} \sin \theta.
 \end{aligned}$$

Em resumo:

$$\begin{aligned}
 B_x &= \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)A_x + \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)A_y + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta A_z, \\
 B_y &= \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)A_x + \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)A_y - \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta A_z, \\
 B_z &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta A_x + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta A_y + \cos \theta A_z.
 \end{aligned}$$

(Para $\theta = 0$, $B_i = A_i$; para $\theta = \pi/2$, a transformação troca parcialmente x e y com z , como esperado de uma rotação de 90° em torno de $\hat{\mathbf{n}}$.) $\square$

e) Valor esperado de $J_{z'}$ para estado $|jm\rangle$

Seja $|jm\rangle$ autovetor de J_z ($m = -j, \dots, j$). O eixo z' forma ângulo θ com z ; sem perda de generalidade, assumimos a rotação no plano xz , ou seja, $\hat{\mathbf{z}}'$ obtido de $\hat{\mathbf{z}}$ por rotação em torno de y por θ . Então

$$J_{z'} = U_y(\theta) J_z U_y^\dagger(\theta) = J_z \cos \theta + J_x \sin \theta$$

(pela fórmula de rotação finita (*) com $\mathbf{A} = \mathbf{J}$ e $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{y}}$). O valor esperado no estado $|jm\rangle$ é

$$\langle jm|J_{z'}|jm\rangle = \cos \theta \langle jm|J_z|jm\rangle + \sin \theta \langle jm|J_x|jm\rangle.$$

Como $J_z|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$, o primeiro termo dá $m\hbar \cos \theta$. Para o segundo termo, notamos que $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ eleva e abaixa m : $\langle jm|J_+|jm\rangle = 0$, $\langle jm|J_-|jm\rangle = 0$, pois $J_\pm|jm\rangle \propto |j, m \pm 1\rangle$ e esses autovetores são ortogonais a $|jm\rangle$. Portanto $\langle jm|J_x|jm\rangle = 0$. Concluimos que

$$\langle jm|J_{z'}|jm\rangle = m\hbar \cos \theta.$$

(Com $\hbar = 1$, o resultado é $m \cos \theta$.) $\square$