8

AULA

Movimento em um campo de forças centrais

METAS:

- Introduzir o problema de dois corpos na mecânica quântica.
- Introduzir a equação de Shrödinger em coordenadas esféricas.
- Explicar a resolução da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas para uma partícula em um potencial central.
- Introduzir os operadores do momento angular de uma partícula.
- Explicar o conservação do momento angular na mecânica quântica.

OBJETIVOS:

Ao fim da aula os alunos deverão ser capazes de:

- usar a técnica da massa reduzida;
- usar a técnica de separação de variáveis na equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas esféricas;
- usar as relações de comutação dos operadores do momento angular;
- usar a conservação do momento angular.

PRÉ-REQUISITOS:

- Equação de Schrödinger e equação de Schrödinger independente do tempo.
- Observáveis e relações de incerteza.

8.1 Introdução

Sistemas no espaço de dimensão três são interessantes por razões óbvias. Iniciaremos nessa aula o estudo do problema de dois corpos na mecânica quântica. O momento angular – uma grandeza que não tem análogo no espaço de dimensão um – é conservado para sistremas isolados. Na mecânica quântica, o momento angular é, talvez, mais importante do que na mecânica clássica.

8.2 Mecânica quântica no espaço de dimensão três

Dado um referencial no espaço, a posição de uma partícula no instante t é caracterizada por três coordenadas cartesianas, x, y, z. Os momentos conjugados às coordenadas são os três componentes do momento linear da partícula, p_x, p_y, p_z, respectivamente.

Na mecânica quântica, o estado de uma partícula num dado instante é representado por uma função normalizada das três coordenada, isto é, por uma função ψ tal que

$$\iiint |\psi(x,y,z)|^2 \, dx \, dy \, dz = 1.$$

8.2.1 Coordenadas e momentos

Os operadores das coordenadas, $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$, são os operadores de multiplicação pelas respectivas coordenadas, por exemplo,

$$\hat{y}\psi(x,y,z) = y\psi(x,y,z).$$

Os operadores dos momentos são

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \qquad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{8.1}$$

È fácil verificar as relações de comutação a seguir.

1. Os operadores das coordenadas comutam,

$$[\hat{x},\hat{y}] = [\hat{y},\hat{z}] = [\hat{z},\hat{x}] = 0. \tag{8.2}$$

2. Os operadores dos momentos comutam,

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0. \tag{8.3}$$

3. Além disso,

   (a) o comutador de cada coordenada com o respectivo momento é igual a $i\hbar$:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar; \tag{8.4}$$

   (b) cada coordenada comuta com os momentos conjugados às outras coordenadas:

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0. \tag{8.5}$$

As relações (8.2), (8.3), (8.4), (8.5) são chamadas *relações de comutação canônicas*.

8.2.2 Observáveis

Os observáveis na mecânica clássica são representados por funções das coordenadas e dos momentos. Na mecânica quântica, associamos operadores hermitianos aos observáveis. A forma do operador associado a um dado observável é, geralmente, indicada pela forma da função associada ao observável na mecânica clássica. Por mais simples que parece o procedimento, dificuldades podem ocorrer porque a multiplicação de variáveis é uma operação comutativa e a multiplicação de operadores não é comutativa. Esse e, no entanto, um problema geral que não depende da dimensão do espaço. Um aspecto novo, em relação a mecânica quântica em uma dimensão, é a necessidade de incorporar no esquema da mecânica quântica os observáveis do spin. Esse assunto será tratado na última aula.

8.3 O problema de dois corpos

Um problema importante na mecânica é o problema de dois corpos.

8.3.1 O problema de dois corpos na mecânica clássica.

Consideremos um sistema isolado de duas partículas interagentes com massas m_1, m_2 e vetores posição $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, respectivamente. Suponhamos que a força de interação é conservativa. Então, o potencial da força é uma função da distância $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ entre as partículas[30] A energia mecânica do sistema, dada por[31]

$$E = \frac{m_1 \mathbf{v}_1^2}{2} + \frac{\mathbf{m}_2 v_2^2}{2} + V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|), \tag{8.6}$$

podemos reescrever na forma

$$E = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\mathbf{V}^2 + \frac{\mu}{2}\mathbf{v}^2 + V(r) \tag{8.7}$$

onde

$$\mathbf{V} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} \tag{8.8}$$

é a velocidade do centro de massa,

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 = \frac{d}{dt}\mathbf{r} \tag{8.9}$$

é a velocidade relativa e

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{8.10}$$

é a *massa reduzida*. A velocidade do centro de massa não depende do tempo[32]. No referencial do centro de massa, $\mathbf{V} = 0$, portanto, a energia no referencial do centro de massa E_{CM} é dada por

$$E_{\mathrm{CM}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r), \tag{8.11}$$

[30] Decorre da terceira lei de Newton que o potencial depende de $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ somente através da diferença $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$. Assumindo que não existem direções privilegiadas no espaço, chegamos a conclusão de que o potencial é uma função do *módulo* r.

[31] Designamos por $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$ as velocidades das partículas.

[32] Porque o momento total do sistema é conservado.

onde $\mathbf{p} = \mu\mathbf{v}$. Mas a expressão na eq. (8.11) coincide à expressão para a energia de uma partícula com massa μ em um campo de forças centrais provenientes do potencial $V(r)$.

O problema de dois corpos se reduz ao problema de uma única partícula em um campo de forças centrais.

8.3.2 O problema de dois corpos na mecânica quântica

Na mecânica quântica, o hamiltoniano de um sistema de dois corpos (no referencial do centro de massa) é dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + \hat{V}, \tag{8.12}$$

onde $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ são os operadores dos momentos conjugados a x, y, z, respectivamente,

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{8.13}$$

e $\hat{V}$ é o operador de multiplicação pela função $V(r)$. A equação de Schrödinger para o sistema é dada por

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(r)\Psi(\mathbf{r},t) \tag{8.14}$$

onde ∇^2 é o operador de Laplace,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{8.15}$$

8.4 A equação de Schrödinger em coordenadas esféricas

A simetria do potencial $V(r)$ e do operador laplaciano ∇^2 em relação de rotações no espaço indicam que poderia ser útil reescrever a equação de Schrödinger usando coordenadas esféricas no espaço. Pondo

$$x = r\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\phi, \qquad y = r\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{sen}\,\phi, \qquad z = r\cos\theta, \tag{8.16}$$

obtemos que o resultado da aplicação do laplaciano a uma função f é dado por

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}. \tag{8.17}$$

A equação de Schrödinger tem a forma

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right] + V(r)\Psi, \tag{8.18}$$

onde Ψ é uma função das coordenadas esféricas r, θ, ϕ e do tempo.

8.4.1 Equação de Schrödinger independente do tempo

Uma função da forma

$$\Psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.19}$$

seria uma solução separável da equação de Schrödinger se $\psi = \psi(r,\theta,\phi)$ for uma solução para a equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right] + V(r)\psi = E\psi. \tag{8.20}$$

8.4.2 Separando variáveis

Procuraremos soluções separáveis da equação (8.20). Pondo

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{8.21}$$

multiplicando por $-2\mu r^2/(\hbar^2 RY)$, obteremos, após uma transposição de termos,

$$\frac{1}{R}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{\partial r}\right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(V(r)-E\right)R\right] = \frac{1}{Y}\left[-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \tag{8.22}$$

O primeiro membro desta equação não depende de θ e ϕ, enquanto o segundo membro não depende de r. O valor comum dos membros é, então, uma constante. Por conveniência, vamos chamar essa constante de $l(l+1)$. Obtemos, então, duas equações:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{\partial r}\right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right) = l(l+1)R, \tag{8.23}$$

$$-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = l(l+1)Y. \tag{8.24}$$

A primeira dessas equações depende da forma do potencial $V(r)$ mas a segunda é a mesma para todo potencial central. vamos encontrar soluções separáveis para a equação (8.24). Pondo

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

e multiplicando os membros da equação por $\operatorname{sen}^2\theta/(\Theta\Phi)$, obteremos, apos umas transposições de alguns termos,

$$\frac{\operatorname{sen}^2\theta}{\Theta}\left[-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - l(l+1)\Theta\right] = \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}. \tag{8.25}$$

O primeiro membro da equação não depende de ϕ e o segundo membro não depende de θ. O valor comum dos membros é uma constante. Por conveniência, chamaremos essa constante de $-m^2$. Obteremos, então, duas equações ordinárias:

$$-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta}\Theta = l(l+1)\Theta, \tag{8.26}$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0. \tag{8.27}$$

A equação (8.27) é fácil de resolver. As soluções aceitáveis satisfazem a condição de periodicidade

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \tag{8.28}$$

para todo ϕ. Com efeito, adicionando 2π ao ângulo ϕ voltamos ao mesmo ponto. Não é difícil verificar que soluções periódicas (com período 2π) existem apenas para valores inteiros de m. É conveniente associar a cada valor inteiro de m uma[33] solução:

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \tag{8.29}$$

8.4.3 Harmônicos esféricos

Soluções aceitáveis da eq. (8.26) existem para valores inteiros de l tais que $l \geq |m|$ (lembramos que m é um inteiro) e são expressas em termos de funções associadas de Legendre[34]. A cada valor inteiro de l, maior ou igual a $|m|$, associamos uma (a menos uma multiplicação por uma constante não-nula) solução $F_{l,|m|}$. Assim a cada valor inteiro não-negativo de l associamos $2l+1$ soluções linearmente independentes da equação (8.24),

$$rY_l^m(\theta,\phi) = A_{lm} e^{im\phi} F_{l,|m|}(\theta), \qquad l = 0, 1, 2, \ldots ; \quad m = -l, -l+1, \ldots l-1, l, \tag{8.30}$$

onde A_{lm} são constantes de normalização. As funções Y_l^m normalizadas são chamadas *harmônicos esféricos*. Resumimos algumas propriedades dessas funções.

1. As funções Y_l^m $(m = -l, \ldots, l)$ satisfazem a equação (8.24) com o respectivo valor de l.

2. As funções Y_l^m são ortogonais e normalizadas,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) \operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\phi = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad (l,m) = (l',m'), \\ 0 & \text{se} \quad (l,m) \neq (l',m'). \end{cases} \tag{8.31}$$

   Existem várias convenções de normalização. Usaremos a normalização definida pela condição

$$Y_l^{-m}(\theta,\phi) = (-1)^m \left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* .$$

[33] A menos uma multiplicação por uma constante não-nula.

[34] Ver, por exemplo, ARFKEN, G; WEBER, H. *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física* Rio de janeiro: Campus, 2007.

Segue uma lista dos primeiros harmônicos esféricos.

$$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}, \qquad Y_2^0 = \mp\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2}\left(3\cos^2\theta - 1\right),$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta, \qquad Y_2^{\pm 1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\operatorname{sen}\theta\,\cos\theta e^{\pm im\phi},$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\operatorname{sen}\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2}\operatorname{sen}^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}.$$

8.5 Momento angular

O papel dos harmônicos esféricos e da própria equação (8.24) se torna obvio depois de conhecermos o formalismo do momento angular na mecânica quântica.

8.5.1 Operadores do momento angular

Na mecânica clássica, o momento angular de uma partícula (em relação a origem) é dado por

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}.$$

Na mecânica quântica, associamos aos componentes do momento angular, L_x, L_y, L_z, os operadores

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \tag{8.32}$$

Os três operadores não comutam. Verifica-se facilmente, que

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y. \tag{8.33}$$

8.5.2 Quantização do momento angular

Usando as fórmulas de transformação (8.16), obteremos os operadores do momento angular expresso em termos de coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar\left(\operatorname{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{cotg}\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
\hat{L}_y &= i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{cotg}\theta\operatorname{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
\hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.
\end{aligned} \tag{8.34}$$

A variável r não aparece nessas expressões. Portanto, podemos interpretar L_x, L_y, L_z como operadores em um espaço de funções definidas sobre a esfera unitária (os pontos da esfera são caracterizados pelas coordenadas θ e ϕ). Os operadores são hermitianos em relação ao produto escalar definido por uma integral sobre a esfera unitária S, a saber,

$$\langle f \mid g\rangle = \iint_S f^* g\, d\Omega, \tag{8.35}$$

onde f e g são funções complexas definidas na esfera e $d\Omega = \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\phi$ é o elemento de área na esfera, isto é,

$$\langle f \mid g\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}[f(\theta,\phi)]^*\, g(\theta,\phi)\operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\phi. \tag{8.36}$$

Definiremos o vetor-operador $\hat{\mathbf{L}}$ por

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{i}\hat{L}_x + \mathbf{j}\hat{L}_y + \mathbf{k}\hat{L}_z, \tag{8.37}$$

onde $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ são os vetores da base canônica associada ao sistema de coordenadas cartesianas. O resultado da aplicação do operador

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{8.38}$$

a uma função $f(\theta,\phi$ é dado por[35]

$$\hat{\mathbf{L}}^2 f(\theta,\phi) = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}\right]. \tag{8.39}$$

[35]EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas.* Rio de Janeiro: Campus, 1979, Apêndice I.

Os harmônicos esféricos Y_l^m para um dado valor de l (lembramos que m toma todos os valores inteiros de $-l$ até l) satisfazem a equação (8.24). Logo, estes harmônicos esféricos satisfazem a equação

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m. \tag{8.40}$$

O harmônico esférico Y_l^m é uma autofunção do operador $\hat{\mathbf{L}}^2$, associada ao autovalor $\hbar^2 l(l+1)$.

Além disso, usando a eq. (08) e a expressão para $\hat{L}_z$ em coordenadas esféricas, obtemos

$$\hat{L}_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m. \tag{8.41}$$

O harmônico esférico Y_l^m é uma autofunção do operador $\hat{L}_z$, associada ao autovalor $\hbar m$.

Não é surpreendente que os operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ e $\hat{L}_z$ possuem autofunções comuns porque esses operadores comutam. Alias, todos os componentes do momento angular comutam com $\hat{\mathbf{L}}^2$:

$$[\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{L}_y, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{L}_z, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0. \tag{8.42}$$

Exemplo 8.1. Existem várias maneiras de provar a eq. (8.42). Mostraremos aqui um método que dispensa a forma explícita dos operadores e utiliza apenas as relações de comutação (8.33).

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] =& [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2] = [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2] \\
=& [\hat{L}_x, \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_y[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_z + \hat{L}_z[\hat{L}_x, \hat{L}_z] \\
=& i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\left(i\hbar\hat{L}_z\right) - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\left(-i\hbar\hat{L}_y\right) = 0
\end{aligned}$$

Tudo isso é um pouco técnico, mas as conclusões físicas são importantes.

1. Na mecânica quântica, o momento angular é quantizado.
2. Os valores possíveis de $\mathbf{L}^2$ são $\hbar^2 l(l+1)$, onde $l = 0, 1, 2, \ldots$.
3. Para um dado valor de l, os valores possíveis de L_z são da forma $\hbar m$, onde $m = -l, -l+1, \ldots, l$.

Uma ilustração dos estados do momento angular $L = \hbar\sqrt{6}$ ("estados do momento angular $l = 2$") é dada na Figura 8.1.

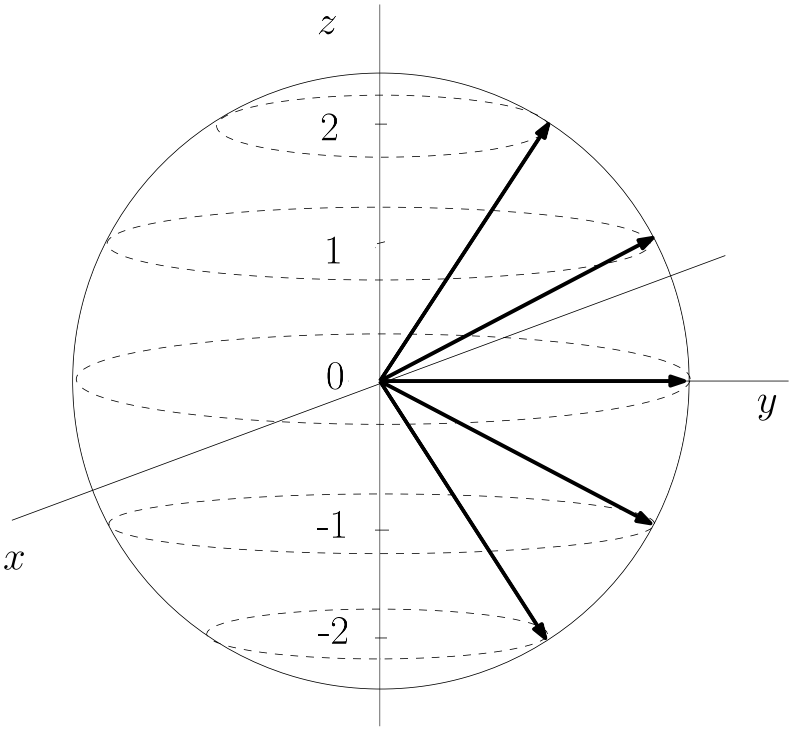

Figura 8.1: Estados do momento angular $l = 2$.

Obviamente, não há nada de especial no terceiro eixo. A conclusão que se refere a L_z permanece é válida, também, para L_x e L_y. O eixo z é mais usado pelo papel que ele tem no sistema de coordenadas esféricas, não na física. Em particular, o operador $\hat{L}_z$ tem a forma mais simples entre os três componentes do momento angular nas fórmulas (8.24).

Um outro aspecto é mais interessante. Segundo a mecânica quântica, o módulo do momento linear L toma valores da forma $\hbar\sqrt{l(l+1)}$, porem, o valor máximo do módulo da projeção do momento angular sobre o eixo z é igual a $\hbar l$. Porque o módulo da projeção não pode ser igual ao módulo do vetor (exceto o caso $l = 0$, no qual $L_z = L = 0$)? A explicação é simples: se $|L_z| = L$, então $L_x = L_y = 0$. Porem, existe uma relação de incerteza que não permite valores determinados para os três componentes do momento angular, se um desse componentes tiver valor deferente de zero. Mostraremos os detalhes na próxima seção.

8.5.3 Incertezas

Consideremos uma partícula no estado representado por uma função normalizada ψ. As incertezas dos componentes L_x, L_y, L_z do momento angular indiquemos por σ_{L_x}, σ_{L_y}, σ_{L_z}, respectivamente. Por exemplo,

$$\sigma_{L_x}^2 = \langle (L_x - \langle L_x \rangle)^2 \rangle.$$

As seguintes relações de incerteza generalizadas[36]

$$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_z \rangle\right|, \qquad \sigma_{L_y}\sigma_{L_z} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_x \rangle\right|, \qquad \sigma_{L_z}\sigma_{L_x} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_y \rangle\right| \tag{8.43}$$

são deduzidas a partir das relações de comutação (8.33). Essas relações são válidas para qualquer estado. Suponhamos agora que o estado do sistema é um estado determinado de $\mathbf{L}^2$ e de L_z simultaneamente, isto é, o estado é representado por uma função normalizada da forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi). \tag{8.44}$$

Num estado determinado de L_z, a incerteza σ_{L_z} é igual a zero e decorre das equações (8.43) que

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \tag{8.45}$$

[36] Ver, por exemplo, GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica.* São Paulo: Pearson, 2011, p 121.

portanto

$$\sigma^2_{L_x} = \langle L^2_x \rangle, \qquad \sigma^2_{L_y} = \langle L^2_y \rangle. \tag{8.46}$$

Os estados determinados de L_z são simétricos em relação as rotações ao redor do eixo z. Portanto, as incertezas de L_x e L_y são iguais. Usaremos a notação

$$\sigma = \sigma_{L_x} = \sigma_{L_y}. \tag{8.47}$$

Finalmente, no estado representado por ψ, eq. (8.44), temos

$$\langle L^2_z \rangle = \hbar^2 m^2. \tag{8.48}$$

Substituindo (8.46), (8.47) e (8.48) na equação

$$\langle \mathbf{L}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1), \tag{8.49}$$

obteremos

$$2\sigma^2 + \hbar^2 m^2 = \hbar^2 l(l+1),$$

donde

$$\sigma_{L_x} = \sigma_{L_y} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{l(l+1) - m^2}. \tag{8.50}$$

O produto das incertezas é igual a

$$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y} = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right].$$

Para o estado ψ, a relação de incerteza (8.43) implica em

$$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle m \rangle\right|, \tag{8.51}$$

logo

$$m^2 + |m| \leq l^2 + l. \tag{8.52}$$

O maior inteiro m que satisfaz a desigualdade é $m = l$ e o menor $m = -l$.

8.5.4 Conservação do momento angular

Na mecânica clássica o momento angular é conservado: o valor do qualquer componente do momento angular total de um sistema isolado independe do tempo.

Todas as manifestações da conservação do momento angular na mecânica quântica são relacionadas a um fato aparentemente abstrato: para um sistema isolado os operadores $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ do momento angular total comutam com o hamiltoniano $\hat{H}$ do sistema, isto é,

$$\left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{H}\right] = 0. \tag{8.53}$$

No exemplo a seguir apresentamos uma demonstração da relação (8.53) para um sistema de dois corpos.

Exemplo 8.2. Mostraremos que, para um sistema de dois corpos isolado os operadores do momento angular total em relação ao centro de massa do sistema comutam com o hamiltoniano. No referencial do centro de massa, o hamiltoniano do sistema é dado pela eq. (8.12). Os operadores do momento angular comutam com o operador da energia potencial $\hat{V}$ porque derivações em relação de θ e ϕ comutam com a multiplicação por $V(r)$. Por outro lado, usando as relações de comutação (8.55), obteremos

$$\begin{aligned}
[\hat{p}_x^2, \hat{L}_x] &= [\hat{p}_x, \hat{L}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = 0, \\
[\hat{p}_y^2, \hat{L}_x] &= [\hat{p}_y, \hat{L}_x]\hat{p}_y + \hat{p}_y[\hat{p}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar\hat{p}_z\hat{p}_y - i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z, \\
[\hat{p}_z^2, \hat{L}_x] &= [\hat{p}_z, \hat{L}_x]\hat{p}_z + \hat{p}_z[\hat{p}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{p}_z\hat{p}_y + i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z.
\end{aligned}$$

Fazendo a soma das três equações, temos

$$[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{L}_x] = 0.$$

De modo análogo, provamos que o operador $\hat{\mathbf{p}}^2$ comuta com $\hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$. Assim, o operador da energia cinética do sistema,

$$\hat{K} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2$$

comuta com os operadores do momento angular. Portanto, o operador hamiltoniano, $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, comuta com os operadores do momento angular.

A relação (8.53) implica em independência dos valores esperados do momento angular total para sistemas isoladas. Com efeito, a função de onda Ψ do sistema satisfaz a equação de Schrödinger, logo

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi. \tag{8.54}$$

Para a taxa de variação do valor esperado, temos

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L}\rangle =&\frac{d}{dt}\langle \Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\Psi\rangle = \langle \frac{\partial}{\partial t}\Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\Psi\rangle + \langle \Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\frac{\partial}{\partial t}\Psi\rangle \\ =&-\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}\Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\hat{H}\Psi\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \Psi \mid \hat{H}\hat{\mathbf{L}}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi \mid \hat{\mathbf{L}}\hat{H}\Psi\rangle \\ =&\frac{1}{i\hbar}\langle \Psi \mid \left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{H}\right]\Psi\rangle = 0.\end{aligned}$$

Não dependem do tempo valores esperados de produtos de componentes do momento angular. Com efeito, se o hamiltoniano comuta com os componentes do momento linear, ele também comuta com qualquer produto dos componentes. Em particular, não depende do tempo o valor esperado de $\mathbf{L}^2$.

Não dependem do tempo as respectivas incertezas. Por exemplo, o quadrado da incerteza de L_z é igual a

$$\sigma_{L_z}^2 = \langle L_z^2\rangle - \langle L_z\rangle^2.$$

Os valores esperados no segundo membro da equação independem do tempo, portanto a incerteza σ_{L_z} não depende do tempo.

Finalmente, consideremos um caso particular, mas importante. Suponhamos que a função de onda $\Psi(x,y,z,t)$ no instante $t = t_0$ á uma autofunção dos operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ e $\hat{L}_z$, isto é,

$$\hat{\mathbf{L}}^2\Psi(x,y,z,t_0) = \hbar l(l+1)\Psi(x,y,z,t), \qquad \hat{L}_z\Psi(x,y,z,t_0) = \hbar m\Psi(x,y,z,t),$$

onde l é um inteiro não negativo e m é um inteiro tal que $-1 \leq m \leq l$. Os valores esperados de $\mathbf{L}^2$ e de L_z independem do tempo, logo,

$$\langle \mathbf{L}^2\rangle = \hbar l(l+1), \qquad \langle L_z\rangle = \hbar m.$$

As respectivas incertezas $\sigma_{\mathbf{L}^2}$ e σ_{L_z} são iguais a zero no instante t_0 (porque o estado do sistema no instante t_0 é um estado determinado de $\mathbf{L}^2$ e L_z). Como não dependem do tempo, as incertezas $\sigma_{\mathbf{L}^2}$ e σ_{L_z} são iguais a zero para todo t. O estado do sistema é um estado determinado de $\mathbf{L}^2$ e $\mathbf{L}_z$ (e com os mesmo autovalores do instante t, é claro).

8.6 Conclusões

- O problema de dois corpos pode ser reduzido ao problema de uma partícula em um campo de forças centrais.
- No caso de um potencial central, a equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas esféricas admite separação de variáveis.
- Os harmônicos esféricos são soluções separáveis da equação (8.24).
- O espectro dos operadores do momento angular é discreto.
- Os harmônicos esféricos são autofunções comuns do operador do quadrado do momento angular $\hat{\mathbf{L}}^2$ e do operador $\hat{L}_z$.
- Os autovalores de $\hat{\mathbf{L}}^2$ (os valores possíveis do quadrado do momento angular) são múltiplos de $\hbar$ da forma $\bar{l}(l+1)$, onde $l = 0, 1, 2, \ldots$.
- As autofunções comuns de $\hat{\mathbf{L}}^2$ e $\hat{L}_z$, associadas a um dado autovalor $\bar{l}(l+1)$ de $\hat{\mathbf{L}}^2$, são associadas a autovalores de $\hat{L}_z$ da forma $\hbar m$, em que $m = -l, -l+1, \ldots, l$.
- O momento angular de uma partícula em um potencial central é conservado.
- Manifesta-se a conservação do momento linear na conservação (independência do tempo) de valores esperados dos componentes do momento linear e do quadrado do momento, incertezas, etc.

- O momento angular total de um sistema isolado de duas partículas é conservado.

8.7 Resumo

Introduzimos as relações canônicas de comutação na mecânica quântica em um espaço de dimensão três. O problema de dois corpos é reduzido ao problema de uma partícula em um potencial de forças centrais. A equação de Schrödinger independente do tempo é reescrita em coordenadas esféricas. Procurando soluções separáveis da equação, encontramos soluções para a equação angular - os harmônicos esféricos. Introduzimos os operadores do momento angular de uma partícula. Mostramos que estes operadores possuem espectro discreto. Usamos relações de incerteza generalizadas para explicar certas características do espectro de L_z. Explicamos a conservação do momento angular.

8.8 Glossário

- harmônicos esféricos
- massa reduzida
- problema de dois corpos
- relações canônicas de comutação

8.9 Atividades

ATIV. 8.1. Mostre que a energia de um sistema de dois corpos (8.6) pode ser posta na forma (8.7).

ATIV. 8.2. Use as relações de comutação (8.2), (8.3), (8.4), (8.5) para mostrar as relações de comutação entre os componentes do momento angular (8.33).

ATIV. 8.3. Use as relações de comutação (8.2), (8.3), (8.4), (8.5) para mostrar as relações de comutação

$$
\begin{aligned}
&[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = 0, \qquad [\hat{p}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{p}_z, \qquad [\hat{p}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{p}_y, \\
&[\hat{p}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar\hat{p}_z, \qquad [\hat{p}_y, \hat{L}_y] = 0, \qquad [\hat{p}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{p}_x, \\
&[\hat{p}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{p}_y, \qquad [\hat{p}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar p_x, \qquad [\hat{p}_z, \hat{L}_z] = 0.
\end{aligned}
\tag{8.55}
$$

8.10 Referências

1. EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas.* Rio de Janeiro: Campus, 1979.

2. GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica.* São Paulo: Pearson, 2011.

3. GASIOROWICZ, S. *Quantum physics.* Third edition. New York: Wiley, 2003.

4. GREINER, W. *Quantum Mechanics: An Introduction.* Berlin: Springer-Verlag, 2000.