



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA**

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

SOLUÇÃO DO ROTOR QUÂNTICO RÍGIDO COM O FORMALISMO DO PDT

**FORTALEZA
2024**

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

SOLUÇÃO DO ROTOR QUÂNTICO RÍGIDO COM O FORMALISMO DO PDTO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física.
Área de Concentração: Física.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

FORTALEZA

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S584s Silva, Willian Wallace Ribeiro Alves da.

Solução do rotor quântico rígido com o formalismo do PDTO / Willian Wallace Ribeiro Alves da Silva. – 2024.

53 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2024.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

1. Formalismo do PDTO. 2. Momento angular. 3. Mecânica quântica. 4. Rotações. I. Título.
CDD 530

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

SOLUÇÃO DO ROTOR QUÂNTICO RÍGIDO COM O FORMALISMO DO PDTO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física.

Aprovada em: 26/02/2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa
Filho (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Job Saraiva Furtado Neto
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

Dr. Vanderley Aguiar de Lima Junior
Universidade Estadual do Ceará (UECE)

À minha família em primeiro lugar, à minha namorada que sempre esteve ao meu lado e, por último, a meus amigos que sempre estiveram do meu lado contribuindo de alguma forma na minha jornada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pois acredito que ele sempre esteve me acompanhando e cuidando para que minhas decisões fossem as melhores dentro dos meus objetivos de vida.

Agradeço à minha família, em especial ao meu pai Edmar, à minha mãe Roberta, ao meu irmão Rylle Alexandre e à minha irmã Débora por todo o apoio, conselhos e experiências que compartilharam comigo até aqui e por contribuirem na formação do homem que sou hoje.

Agradeço de forma especial à minha namorada Letícia e toda a sua família por todo o carinho, apoio e confiança que sempre tiveram em mim. Obrigado por me apoiarem em uma das decisões mais difíceis que já tomei.

Agradeço também aos meus amigos Wagner, João Pedro, Genivaldo, Thais, Thiago, Bruno e Jackson, pelas conversas sobre o trabalho de mestrado e coisas do dia a dia, pelos momentos que compartilhamos juntos e por toda a alegria que vocês me proporcionaram neste período extremamente árduo e difícil. Certamente eu não chegaria onde cheguei sem vocês.

Agradeço aos responsáveis pela elaboração do *template* utilizado neste trabalho e pela adequação para que o mesmo ficasse de acordo com as normas da biblioteca da Universidade Federal do Ceará (UFC).

Agradeço ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho por me receber e me orientar durante o mestrado. Agradeço ao Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa, ao Job Saraiva Furtado Neto e ao Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior por acompanharem o desenvolvimento e participarem da banca dessa dissertação de mestrado, bem como a todos os funcionários e professores do departamento de Física que contribuíram de alguma forma na minha formação acadêmica.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

"Se você acha que entendeu a física quântica, é
porque você não entendeu." (Richard Feynman,
1918-1988)

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo central a incorporação do momento angular na construção do formalismo do *Position Dependent Translation Operator*(*PDTO*) no contexto da mecânica quântica, especialmente para problemas que envolvem rotação. Para atingir esse objetivo, realizamos a construção do momento angular dentro do formalismo convencional da mecânica quântica e também desenvolvemos o formalismo tridimensional do *PDTO*. Nesse sentido, a construção do momento angular no formalismo tradicional envolveu a utilização de operadores e equações que descrevem o comportamento do momento angular orbital e de spin. Exploramos as propriedades matemáticas desses operadores, para garantir uma descrição consistente do momento angular dentro do contexto quântico. Em seguida, abordamos a construção do formalismo do *PDTO* tridimensional, levando em consideração as variações espaciais das propriedades do meio em que as partículas se encontram. Isso envolveu a generalização das equações do *PDTO* para o caso tridimensional e a análise das propriedades físicas e matemáticas desse formalismo. Uma vez construídos o momento angular no formalismo quântico tradicional e o formalismo do *PDTO* tridimensional, o próximo passo foi a construção do momento angular dentro do formalismo do *PDTO*. Nesse processo, investigamos como as expressões matemáticas que envolvem o momento angular seriam modificadas e adaptadas ao novo formalismo, levando em conta as características do *PDTO* e suas implicações na mecânica quântica. Por fim, com a parte teórica estabelecida, o objetivo final é aplicar o novo formalismo desenvolvido a um problema físico conhecido. Isso nos permitirá explorar as implicações do formalismo do *PDTO* com momento angular e analisar suas consequências para o sistema em estudo. Com essa aplicação, poderemos obter novos insights, entender melhor a dinâmica do sistema e verificar a viabilidade e relevância do formalismo proposto. Dessa forma, espera-se que este trabalho contribua para o avanço do conhecimento na mecânica quântica, ao introduzir o momento angular no formalismo do *PDTO* e explorar suas implicações teóricas e práticas. Além disso, é possível que essa abordagem tenha aplicações em outras áreas da física, como física de materiais, óptica quântica e computação quântica, abrindo novas perspectivas para futuras pesquisas e desenvolvimentos científicos e tecnológicos.

Palavras-chave: formalismo do *PDTO*; momento angular; mecânica quântica; rotações.

ABSTRACT

The main objective of this work is to incorporate angular momentum into the construction of the *Position Dependent Translation Operator (PDTO)* formalism in the context of quantum mechanics, especially for problems involving rotation. To achieve this goal, we constructed the angular momentum within the conventional formalism of quantum mechanics and also developed the three-dimensional *PDTO* formalism. In this regard, the construction of angular momentum in the traditional formalism involved the use of operators and equations that describe the behavior of orbital and spin angular momentum. We explored the mathematical properties of these operators to ensure a consistent description of angular momentum within the quantum context. Next, we addressed the construction of the three-dimensional *PDTO* formalism, taking into account the spatial variations of the properties of the medium in which the particles are located. This involved the generalization of the *PDTO* equations to the three-dimensional case and the analysis of the physical and mathematical properties of this formalism. Once the angular momentum was constructed within the conventional quantum formalism and the three-dimensional *PDTO* formalism, the next step was to construct the angular momentum within the *PDTO* formalism. In this process, we investigated how the mathematical expressions involving angular momentum would be modified and adapted to the new formalism, considering the characteristics of the *PDTO* and its implications in quantum mechanics. Finally, with the theoretical part established, the ultimate goal is to apply the newly developed formalism to a known physical problem. This will allow us to explore the implications of the *PDTO* formalism with angular momentum and analyze its consequences for the system under study. Through this application, we can gain new insights, better understand the dynamics of the system, and verify the viability and relevance of the proposed formalism. Thus, it is expected that this work contributes to the advancement of knowledge in quantum mechanics by introducing angular momentum into the *PDTO* formalism and exploring its theoretical and practical implications. Moreover, this approach may have applications in other areas of physics, such as materials science, quantum optics, and quantum computing, opening new perspectives for future research and scientific and technological developments.

Keywords: *PDTO* formalism; angular momentum; quantum mechanics; rotations.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Representação de um rotor quântico fixo bidimensional utilizando dois corpos.	39
Figura 2 – Representação de um rotor quântico fixo bidimensional utilizando a massa reduzida.	40
Figura 3 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$	41
Figura 4 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$	41
Figura 5 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$	42
Figura 6 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$	43
Figura 7 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$	45
Figura 8 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$	46
Figura 9 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$	46
Figura 10 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$	47
Figura 11 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$	48
Figura 12 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$	49
Figura 13 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$	49
Figura 14 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$	50

LISTA DE SÍMBOLOS

i	Unidade imaginária
h	Constante de Planck
\hbar	Constante reduzida de Planck
γ	Constante com dimensão de inverso de comprimento
E	Energia
ψ	Função de onda
δ_{mn}	Delta de Kronecker
ϵ_{ijk}	Tensor de Levi-Civitta
$ g $	Determinante da métrica
g_{ij}	Tensor métrico
m	Massa
t	Tempo

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	OPERADOR DE MOMENTO ANGULAR NA MECÂNICA QUÂNTICA	14
2.1	Grupos e suas representações	14
2.1.1	<i>Geradores de um grupo</i>	15
2.1.2	<i>Grupo $SO(3)$</i>	15
2.1.3	<i>Grupo $SU(2)$</i>	17
2.2	Momento angular na mecânica clássica	19
2.3	Momento angular na mecânica quântica	21
2.4	Aplicação de momento angular orbital na mecânica quântica	29
3	FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO	33
3.1	Espaço de hilbert modificado em 3 dimensões	33
3.2	Equação de Schrödinger modificada em Coordenadas Polares	37
3.3	Operador de momento angular orbital na direção z no formalismo do <i>PDTO</i>	38
4	RESULTADOS	39
4.1	Rotor Quântico Fixo bidimensional usual	39
4.2	Rotor Quântico Fixo bidimensional no formalismo do <i>PDTO</i>	43
4.2.1	<i>Solução para $f(\phi) = 1 + \gamma\phi$:</i>	44
4.2.2	<i>Solução para $f(\phi) = 1 + \gamma \sin \phi$:</i>	46
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	51
	REFERÊNCIAS	52

1 INTRODUÇÃO

A mecânica quântica, uma teoria fundamental que descreve o comportamento das partículas em escalas atômicas e subatômicas, surgiu como resultado de um longo processo de desenvolvimento científico. No início do século XX, experimentos e observações realizados por físicos como Max Planck e Albert Einstein desafiam as ideias estabelecidas pela física clássica, levando ao desenvolvimento da teoria quântica. A ideia principal da mecânica quântica é que, no limite de tamanhos atômicos, a natureza possui um caráter quantizado.

Um marco histórico importante foi a formulação da teoria quântica por Niels Bohr em 1913, com seu modelo do átomo de hidrogênio, que introduziu a ideia de níveis de energia discretos e orbitais eletrônicos. Essa abordagem pioneira estabeleceu as bases para a compreensão das propriedades quânticas dos sistemas físicos.

Nesse contexto, o momento angular desempenha um papel crucial na descrição da estrutura e das propriedades dos sistemas quânticos (Griffiths e Schroeter, 2018). O momento angular, tanto orbital quanto de spin, é uma grandeza física relacionada às rotações. Na mecânica quântica, da mesma forma que outros observáveis como: energia, posição e momento linear; o momento angular está sujeito à quantização, assumindo apenas valores discretos. Essa característica quantizada do momento angular tem implicações profundas na estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos, influenciando a formação de níveis de energia discretos e a natureza dos orbitais eletrônicos (Feynman *et al.*, 2009).

Um aspecto relevante na formulação da mecânica quântica é a consideração das variações espaciais das propriedades do meio em que uma partícula se encontra. É nesse contexto que surge o conceito de operador de translação dependente da posição (*PDTO*) (Costa Filho *et al.*, 2011), em que os autores do artigo propõe uma modificação na construção do operador de translação e tal modificação leva a mudanças na forma do operador de momento linear, bem como nas relações de comutação entre os operadores de posição e de momento e, consequentemente, na relação de incerteza entre esses dois operadores. A partir das mudanças consideradas no operador de translação é possível obter uma equação de Schrödinger modificada e resolvê-la a fim de obter as funções de onda e as autoenergias do problema em consideração. Através deste formalismo, foi possível mapear um oscilador harmônico em um espaço deformado para um oscilador de Morse em um espaço regular por primeiros princípios (Costa Filho *et al.*, 2013).

O *PDTO* é uma ferramenta teórica que leva em conta as flutuações espaciais do meio, o que pode ser especialmente relevante em estudos de materiais bidimensionais, como pode ser

visto em (Aguiar *et al.*, 2020; Costa Filho *et al.*, 2021). No primeiro, os autores utilizam do formalismo do *PDTO* para estudar os efeitos da métrica do espaço no comportamento de fermions de Dirac no grafeno, de modo que foi possível mostrar que este formalismo é útil para tratar o problema tanto da perspectiva de fermions em movimento em grafeno deformado, quanto da perspectiva de que existe um substrato específico depositado no grafeno responsável por modificar o comportamento eletrônico do fermion no material. No segundo, os autores mostraram que o formalismo do *PDTO* é uma alternativa viável para ser aplicada para o caso do gás de elétrons bidimensional, em que um dos resultados obtidos foi obter a correção para a massa do elétron, bem como a correção dos níveis de energia análogas as correções relativísticas. Tais correções surgem diretamente de como o formalismo foi construído.

Por outro lado, uma outra forma de enxergar o uso do formalismo do *PDTO* é na aplicação em problemas com massa dependente da posição, como pode ser visto em (Barbagiovanni e Costa Filho, 2014; Barbagiovanni *et al.*, 2015). Com base nesses fundamentos, surge a motivação para explorar a interação entre o momento angular e o *PDTO* no contexto da mecânica quântica. Estudar como o momento angular é afetado pelo *PDTO* e como essas duas grandezas interagem entre si oferece uma perspectiva de investigação fascinante sobre a dinâmica e as propriedades dos sistemas quânticos.

Além de seu interesse conceitual, essa interação pode ter implicações práticas em diversas áreas da ciência e tecnologia. Na física de materiais, por exemplo, a compreensão do comportamento do momento angular em sistemas com *PDTO* pode abrir caminho para a descoberta e o desenvolvimento de novos materiais com propriedades controláveis e interessantes para aplicações em eletrônica, fotônica e dispositivos quânticos (Aguiar *et al.*, 2020; Costa Filho *et al.*, 2021).

Na óptica quântica, a consideração conjunta do momento angular e do *PDTO* pode levar a avanços na geração e manipulação de feixes de luz com características especiais, como o orbital angular, que tem sido explorado para aumentar a capacidade de comunicação e a resolução em sistemas ópticos (Zhou *et al.*, 2016).

Dessa forma, a investigação do momento angular em conjunto com *PDTO* na mecânica quântica oferece uma caminho para avançar nosso entendimento do mundo quântico e explorar suas aplicações em diversas áreas científicas e tecnológicas. Por meio da construção teórica e de possíveis estudos experimentais, podemos desvendar as propriedades e as interações entre esses conceitos fundamentais, impulsionando um pouco mais a fronteira do conhecimento

e servindo de suporte para novas descobertas e aplicações no campo da mecânica quântica.

No capítulo 2, buscamos fazer uma construção completa da base teórica necessária para discutirmos sobre momento angular. Essa construção se inicia desde teoria de grupos, descrevendo especificamente os grupos $SO(3)$ e $SU(2)$, passando também pelo conceito clássico de momento angular e finalmente chegando no formalismo geral de momento angular na mecânica quântica. No capítulo 3, introduzimos o formalismo do *PDTO* em três dimensões, no qual partimos de um espaço curvo e que nos levou a modificações no espaço de Hilbert usual. Em seguida, definimos as novas relações de ortonormalidade e completeza que este espaço satisfaz, bem como introduzimos o conceito de translação dependente da posição. Com isto, obtivemos novas relações de comutação para os operadores de posição e momento, o que nos leva também a uma hamiltoniana modificada e, como consequência, uma equação de Schrödinger modificada. Ademais, mostramos a forma da equação de Schrödinger para uma métrica específica e também propomos um operador de momento angular modificado baseado na ideia conceitual do formalismo do *PDTO*. No capítulo 4, focamos nas aplicações dos capítulos 2 e 3, no qual resolvemos o problema do rotor quântico rígido bidimensional usual, onde plotamos os gráficos das funções de onda e das energias, bem como resolvemos o rotor quântico rígido bidimensional no formalismo do *PDTO* para dois casos diferentes da métrica. Porfim, no capítulo 5, explicitamos as conclusões obtidas com este trabalho, bem como as perspectivas futuras.

2 OPERADOR DE MOMENTO ANGULAR NA MECÂNICA QUÂNTICA

O momento angular é uma quantidade física fundamental que descreve rotações em um determinado sistema físico, seja ele um corpo extenso ou, sistemas de uma ou mais partículas. Em mecânica quântica, grandezas físicas são obtidas pela atuação de um operador hermitiano¹ em um estado quântico. Este operador hermitiano é chamado de observável e um dos observáveis mais úteis em mecânica quântica é o momento angular, seja ele orbital ou de spin. O objetivo deste capítulo é fazer a construção da teoria de momento angular na mecânica quântica.

2.1 Grupos e suas representações

Primeiramente, vamos definir o que é um grupo. Seja um determinado conjunto G , no qual definimos uma operação “ \odot ”. Este conjunto G forma um grupo se as seguintes propriedades forem satisfeitas (Barcelos Neto, 2010):

- I. Se $u \in G$ e $v \in G$, então $u \odot v \in G$ (Fechamento).
- II. Para todo $u, v, w \in G$, temos $(u \odot v) \odot w = u \odot (v \odot w)$ (Associação).
- III. Existe um elemento identidade $i \in G$ tal que para todo $u \in G$ temos $u \odot i = i \odot u = u$ (Identidade).
- IV. Para todo $u \in G$, existe um elemento inverso, denotado por u^{-1} , que também pertence a G , tal que $u \odot u^{-1} = u^{-1} \odot u = i$ (Elemento inverso).

Portanto, com isto G forma um grupo sobre a operação “ \odot ”. Existe um tipo especial de grupo chamado grupo abeliano(ou comutativo) que necessita de uma quinta condição a ser satisfeita. Esta condição é:

- V. Para todo $u, v \in G$ vale que $u \odot v = v \odot u$ (Comutatividade).
- Se a condição “V” não for satisfeita o grupo é dito não-abeliano(ou não-comutativo). Podemos associar essas “quantidades” abstratas com a Física por meio do que chamamos de representação. Para exemplificar, associamos cada elemento de G com uma matriz M ,

$$u \longleftrightarrow M(u)$$

$$v \longleftrightarrow M(v)$$

$$w \longleftrightarrow M(w) \text{ etc.}$$

¹ É importante notar que existem observáveis não-hermitianos com autovalores reais como pode ser verificado em (Bender e Boettcher, 1998; Bender, 2005; Bender, 2007; Bender, 2015).

de modo que $M(u)$, $M(v)$, $M(w)$, etc, também formem um grupo sob uma operação “ \odot ” de multiplicação matricial, preservando as mesmas propriedades obedecidas pelo grupo G ditas anteriormente. Duas representações são ditas equivalentes se estiverem relacionadas por uma transformação do tipo

$$M'(u) = SM(u)S^{-1}, \quad (2.1)$$

onde S é um operador que é o mesmo para todos os elementos do grupo. A transformação 2.1 é dita transformação de similaridade. É possível mostrar que a representação M' é equivalente a representação M pois satisfaz as mesmas propriedades.

2.1.1 Geradores de um grupo

Dentro da noção de teoria de grupos, existe uma classe de elementos que geram um determinado grupo. Estes elementos são chamados de geradores.

2.1.2 Grupo $SO(3)$

O grupo $SO(3)$ é um grupo de transformações lineares que preserva a norma e a orientação dos vetores tridimensionais. Ele é conhecido como grupo das rotações tridimensionais, onde SO significa *Special Orthogonal*(especial ortogonal) e o número 3 se refere às três dimensões do espaço. Estas transformações lineares podem ser representadas por matrizes 3×3 cujo determinante é igual a 1, por isso o nome especial. Essa característica do determinante significa que as transformações preservam o volume do espaço tridimensional e sua orientação.

A construção do grupo $SO(3)$ pode ser feita a partir de rotações em torno de eixos fixos no espaço tridimensional. Para visualizar isso, considere uma esfera unitária centrada na origem do sistema de coordenadas. Cada ponto na superfície da esfera representa um vetor unitário, e as rotações são representadas por transformações que preservam a distância entre os pontos na superfície.

Uma rotação em torno de um eixo fixo no espaço pode ser descrita por um ângulo de rotação e um vetor de direção do eixo fixo no qual a rotação será realizada. O ângulo de rotação determina a magnitude da rotação, enquanto o vetor de direção do eixo define a orientação do eixo em relação ao sistema de coordenadas que está sendo utilizado. Uma rotação completa de 360 graus(ou 2π radianos) ao redor de qualquer eixo é a identidade, ou seja, a rotação mantém o vetor idêntico ao vetor inicial.

O grupo $SO(3)$ pertence a uma classe de grupos chamados de grupos de Lie. Um grupo de Lie é um grupo tal que os geradores desse grupo obedecem a seguinte álgebra (Barcelos Neto, 2017):

$$[X_\alpha, X_\beta] = i f_{\alpha\beta\lambda} X_\lambda. \quad (2.2)$$

Onde X_α , X_β e X_λ são os geradores do grupo e $f_{\alpha\beta\lambda}$ é chamada de constante de estrutura. Dito isto, vamos determinar quem são os geradores do grupo $SO(3)$. Seja M um operador matricial. Como estamos falando no contexto de um grupo ortogonal, então M é uma matriz ortogonal, isso significa que

$$M^t M = \mathbb{1}, \quad (2.3)$$

onde M^t é a transposta de M . Expandindo (2.3) em termos dos geradores do grupo com os parâmetros m_α infinitesimais e considerando a ortogonalidade das matrizes M , temos

$$\begin{aligned} M^t M &\simeq (\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha^t)(\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha) \\ &\simeq \mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha^t + im_\alpha X_\alpha \\ &= \mathbb{1} + im_\alpha(X_\alpha^t + X_\alpha). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Igualando (2.3) e (2.4), obtemos que

$$X_\alpha^t = -X_\alpha, \quad (2.5)$$

ou seja, os geradores X_α são antissimétricos e podem ser escritos, de forma geral, como

$$im_\alpha X_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & c & -b \\ -c & 0 & a \\ b & -a & 0 \end{pmatrix} = iaX_1 + ibX_2 + icX_3. \quad (2.6)$$

De (2.6) podemos obter as expressões dos geradores X_α , que são

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Notemos que os geradores X_α satisfazem (2.2) com a constante de estrutura $f_{\alpha\beta\lambda} = \epsilon_{\alpha\beta\lambda}$, com $\epsilon_{\alpha\beta\lambda}$ sendo o tensor de Levi-Civita. Em outras palavras,

$$[X_\alpha, X_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\lambda} X_\lambda. \quad (2.8)$$

Para exemplificar, analisemos o comutador de X_1 e X_2

$$\begin{aligned} [X_1, X_2] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = iX_3. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Repetindo este cálculo para os outros geradores obtemos exatamente a relação dada por (2.8). Veremos adiante que as componentes do momento angular também satisfazem esta mesma álgebra e por este motivo ele é chamado de gerador das rotações.

2.1.3 Grupo $SU(2)$

O grupo $SU(2)$ é o grupo conhecido como *Special Unitary*(especial unitário). Este grupo é formado pelas matrizes 2×2 , unitárias, com determinante 1 e com os geradores desse grupo possuindo traço nulo. Ser uma matriz unitária significa que a multiplicação de uma matriz(M) pela sua conjugada hermitiana(M^\dagger) é a identidade($\mathbb{1}$), ou seja,

$$MM^\dagger = M^\dagger M = \mathbb{1}. \tag{2.10}$$

As matrizes do grupo $SU(2)$ são de extrema importância em mecânica quântica, pois desempenham um papel fundamental na descrição de partículas elementares com *spin* 1/2. O *spin* de uma partícula é um tipo de momento angular intrínseco da partícula. Este grupo também é um grupo de Lie e, portanto, seus geradores obedecem a mesma álgebra apresentada em (2.2). Para obter os seus geradores, vamos expandir a matriz M em termos dos seus geradores e dos parâmetros m_α infinitesimais e considerar a unitariedade, semelhante ao que fizemos para o $SO(3)$. Portanto, temos

$$\begin{aligned} M^\dagger M &\simeq (\mathbb{1} - im_\alpha X_\alpha^\dagger)(\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha) \\ &\simeq \mathbb{1} - im_\alpha X_\alpha^\dagger + im_\alpha X_\alpha \\ &= \mathbb{1} + im_\alpha(X_\alpha - X_\alpha^\dagger). \end{aligned} \tag{2.11}$$

Igualando (2.11) e (2.10), obtemos que

$$X_\alpha = X_\alpha^\dagger, \tag{2.12}$$

ou seja, estas matrizes devem ser, de fato, hermitianas. Uma matriz hermitiana 2×2 , de forma geral, pode ser escrita como

$$m_\alpha X_\alpha = \begin{pmatrix} c & a - ib \\ a + ib & d \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

mas como o determinante de M tem que ser igual a 1, isso nos leva ao fato de que o traço de $m_\alpha X_\alpha$ seja igual a zero, pois

$$\begin{aligned} \det A &= \det(\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha) = \det(\exp\{\ln(\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha)\}) \\ &= \exp\{\text{tr}(\ln(\mathbb{1} + im_\alpha X_\alpha))\} \simeq \exp\{\text{tr}(im_\alpha X_\alpha)\}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Como o traço de $m_\alpha X_\alpha$ é zero, a condição $d = -c$ deve ser satisfeita e a expressão geral dos geradores será

$$m_\alpha X_\alpha = \begin{pmatrix} c & a - ib \\ a + ib & -c \end{pmatrix} = aX_1 + bX_2 + cX_3. \quad (2.15)$$

De (2.15) podemos obter as expressões dos geradores X_α , que são

$$X_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Notemos que os geradores são proporcionais as matrizes σ de Pauli, com a constante de proporcionalidade escolhida de forma conveniente para que seja preservada a álgebra dos geradores do grupo $SO(3)$ dada em 2.8. Para verificar isto, consideremos o comutador de X_1 e X_2 , temos então que

$$\begin{aligned} [X_1, X_2] &= \frac{1}{4} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \\ &= iX_3, \end{aligned} \quad (2.17)$$

Repetindo estes cálculos para os outros geradores obtemos justamente a mesma equação (2.8). Pelo fato dos grupos $SO(3)$ e $SU(2)$ satisfazerem a mesma álgebra, eles podem ser interpretados como sendo representações diferentes de um mesmo grupo. É importante lembrar que estes grupos são homomórficos, ou seja, existe uma função que preserva a estrutura algébrica entre estes grupos. Contudo, eles não são isomórficos pois não há uma bijeção entre estes grupos. Em outras palavras, existe um mapa 2 para 1 homomórfico do grupo $SU(2)$ nos elementos do grupo $SO(3)$.

2.2 Momento angular na mecânica clássica

Antes de falarmos de momento angular na mecânica quântica, é interessante fazer uma breve digressão de momento angular no contexto de mecânica clássica (Zwiebach, 2022). Primeiro, consideremos um conjunto de n partículas em movimento, cada uma com massa m_i e posição $\mathbf{r}_i(t)$ medida relativa a alguma origem de um sistema de coordenadas. O índice i nas grandezas representa uma identificação de cada partícula. A velocidade de cada partícula é dada pela derivada em relação ao tempo do vetor posição da partícula e a massa total do sistema é simplesmente a soma de todas as massas, ou seja,

$$\mathbf{V}_i(t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t) \quad \text{e} \quad M = \sum_i^n m_i. \quad (2.18)$$

Por convenção, o ponto acima do vetor representa a derivada em relação ao tempo deste mesmo vetor. Podemos definir a posição do centro de massa(CM) $\mathbf{R}(t)$ e a velocidade do centro de massa $\mathbf{V}(t)$ para este sistema de partículas da seguinte forma:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{M} \sum_i^n m_i \mathbf{R}_i, \quad \mathbf{V} = \dot{\mathbf{R}} = \frac{1}{M} \sum_i^n m_i \mathbf{V}_i. \quad (2.19)$$

Por fim, vamos definir \mathbf{r}'_i e \mathbf{v}'_i como os vetores posição e velocidade de cada partícula relativos ao centro de massa, de modo que

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R} + \mathbf{r}'_i \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_i = \mathbf{V} + \mathbf{v}'_i. \quad (2.20)$$

É interessante mostrar para uso futuro quanto vale a grandeza $\sum_i m_i \mathbf{r}'_i$, assim

$$\sum_i^n m_i \mathbf{r}'_i = \sum_i^n m_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{R}) = M \mathbf{R} - \mathbf{R} \sum_i^n m_i = M \mathbf{R} - \mathbf{R} M = 0. \quad (2.21)$$

De (2.21), é imediato que

$$\sum_i^n m_i \mathbf{v}'_i = 0, \quad (2.22)$$

pois esta última é simplesmente a derivada em relação ao tempo da anterior. O momento angular de uma partícula é definido como

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i = \mathbf{r}_i \times m_i \mathbf{v}_i. \quad (2.23)$$

Agora vamos calcular o momento angular total desse sistema com relação a origem do sistema de coordenadas, para isso, basta somar (2.23) sobre todos os i 's, temos então

$$\mathbf{J} = \sum_i^n \mathbf{r}_i \times m_i \mathbf{v}_i = \sum_i^n (\mathbf{R} + \mathbf{r}'_i) \times m_i (\mathbf{V} + \mathbf{v}'_i), \quad (2.24)$$

onde a notação J para momento angular total foi colocada por conveniência, bem como a escrita em termos dos vetores de posição e velocidade relativos ao CM. Expandindo o produto vetorial em (2.24), temos

$$\mathbf{J} = \mathbf{R} \times \mathbf{V} \sum_i^n m_i + \mathbf{R} \times \left(\sum_i^n m_i \mathbf{v}'_i \right) + \left(\sum_i^n m_i \mathbf{r}'_i \right) \times \mathbf{V} + \sum_i^n \mathbf{r}'_i \times m_i \mathbf{v}'_i. \quad (2.25)$$

Devido (2.21) e (2.22), o segundo e o terceiro termo do lado direito da equação anterior são identicamente zero, de modo que

$$\mathbf{J} = \mathbf{R} \times M\mathbf{V} + \sum_i^n \mathbf{r}'_i \times m_i \mathbf{v}'_i. \quad (2.26)$$

Em resumo, vemos que o momento angular total é a soma das partes de momento angular do CM em relação a origem, momento angular orbital(L), e do momento angular de cada partícula relativo ao centro de massa, que podemos chamar de momento de spin(S). Então,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{R} \times M\mathbf{V}, \quad \mathbf{S} = \sum_i^n \mathbf{r}'_i \times m_i \mathbf{v}'_i. \quad (2.27)$$

Notemos que para essa construção foi considerado o caso de um sistema com distribuição de massa discreta, porém, se quiséssemos um sistema com distribuição contínua de massa, bastaria replicar os desenvolvimentos substituindo os somatórios por integrais, tornando-os igualmente válidos para o caso contínuo. É importante lembrar também que toda essa construção leva em consideração partículas de tamanho finito orbitando em torno do centro de massa e rotacionando em torno de um eixo ligado ao centro de massa. Se quiséssemos considerar partículas pontuais em que a posição destas partículas em relação à origem do sistema de coordenadas coincide com a posição do centro de massa, $\mathbf{r}'_i = 0$, de modo que todo o momento angular deste sistema é puramente orbital.

Contudo, sabe-se que na mecânica quântica existe um tipo de momento angular intrínseco de cada partícula, que independe do fato da partícula estar se movendo ou rotacionado para existir. Este momento angular intrínseco é chamado de spin, que por sua vez não tem um análogo clássico, apesar de termos nomeado convenientemente de momento de spin o terceiro termo em (2.27). Esta conveniência tem origem no fato de que, como veremos a seguir, na mecânica quântica o momento angular total de um sistema pode ser escrito da mesma forma que em (2.27), ou então, se tivermos interessados somente na parte orbital ou de spin, escrevemos somente em termos de \mathbf{L} ou \mathbf{S} .

2.3 Momento angular na mecânica quântica

Como vimos anteriormente, o momento angular é uma grandeza física que está relacionada com as rotações. Na mecânica quântica, uma grandeza física pode ser medida através de algo que chamamos de observável. Um observável nada mais é que um operador hermitiano que contém a informação de alguma grandeza física. Vamos iniciar a discussão considerando, inicialmente, a grandeza de momento angular orbital. As informações de tal grandeza na mecânica quântica, são obtidas por meio do observável vetorial \mathbf{L} , cujas componentes em cada direção do espaço são L_x , L_y e L_z . Este observável \mathbf{L} é definido da mesma forma que no contexto clássico, contudo, ao invés de vetores, a definição é feita através dos observáveis vetoriais de posição e momento (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2019). Em outras palavras,

$$\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}. \quad (2.28)$$

Portanto, cada componente do operador de momento angular orbital teria a seguinte expressão

$$L_x = YP_z - ZP_y, \quad L_y = ZP_x - XP_z \quad \text{e} \quad L_z = XP_y - YP_x. \quad (2.29)$$

Uma observação importante a ser feita está relacionada com o fato de que cada componente do operador de posição e do operador de momento linear obedecem a relação de comutação canônica, dada por

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (2.30)$$

Como os operadores de momento e posição comutam quando estão em diferentes direções, não existe problema de ambiguidade na definição de \mathbf{L} . Além disso, podemos verificar facilmente que

$$[X_i, X_j] = 0 \quad \text{e} \quad [P_i, P_j] = 0. \quad (2.31)$$

Agora, sabendo que as relações em (2.30) e (2.31) são válidas, podemos calcular diretamente a relação de comutação de cada componente de momento angular. Vejamos para L_x e L_y ,

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] \\ &= [YP_z, ZP_x] - [YP_z, XP_z] - [ZP_y, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] \\ &= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Os termos dos comutadores com sinal negativo na equação anterior se anulam automaticamente, pois todos os operadores comutam entre si. Continuando o cálculo, temos

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= Z [Y, P_x] P_z + Y [P_z, Z] P_x + X [Z, P_z] P_y + Z [P_y, X] P_z \\
 &= Y [P_z, Z] P_x + X [Z, P_z] P_y \\
 &= i\hbar(X P_y - Y P_x) \\
 &= i\hbar L_z.
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Notemos que de (2.32) para (2.33) foi necessário fazer uso das seguintes propriedades dos comutadores:

I. Sejam A, B e C operadores. Se $[AB, C]$, então vale que

$$[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]. \tag{2.34}$$

II. Sejam A, B e C operadores. Se $[A, BC]$, então vale que

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C. \tag{2.35}$$

III. Sejam A, B, C e D operadores em que A comuta com C e B comuta com D. Se $[AB, CD]$, então vale que

$$[AB, CD] = C[A, D]B + A[B, C]D. \tag{2.36}$$

Ao repetir este cálculo para os comutadores de L_y com L_z e L_z com L_x , obteremos os seguintes resultados

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad \text{e} \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y. \tag{2.37}$$

Combinando os resultados de (2.33) e (2.37), obtemos que

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \tag{2.38}$$

Ao comparar o resultado em (2.38) com o resultado em (2.8), vemos que as expressões matemáticas são idênticas a menos de uma constante. Portanto, as componentes de \mathbf{L} podem ser vistas como geradores do grupo $SO(3)$, que é o grupo das rotações, em outras palavras, estes operadores são os geradores das rotações no espaço tridimensional. Podemos definir um operador mais geral \mathbf{L}^2 da seguinte forma²

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2. \tag{2.39}$$

² No contexto de teoria de grupos o operador \mathbf{L}^2 é chamado de operador de Casimir. Este operador é construído de forma que comute com todos os geradores da representação de um determinado grupo.

A utilidade deste operador se dá no fato de conter a informação física do momento angular em cada direção do espaço, pois é uma função de cada componente de \mathbf{L} . Vamos agora calcular o comutador de \mathbf{L}^2 com a componente L_x ,

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \\ &= i\hbar(-L_yL_z - L_zL_y + L_zL_y + L_yL_z) = 0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Repetindo este cálculo para as componentes L_y e L_z , chegamos aos seguintes resultados

$$[L^2, L_y] = 0 \quad \text{e} \quad [L^2, L_z] = 0. \quad (2.41)$$

Considerando o caso de uma partícula sem spin sujeita a um potencial central, o momento angular orbital é uma constante de movimento e, portanto, comuta com o hamiltoniano do sistema. Como cada componente de \mathbf{L} comuta com H , então L^2 também comuta com H . Contudo, as componentes de \mathbf{L} não comutam entre si, de modo que não é possível termos um estado que seja autoestado simultâneo de H e de cada componente de \mathbf{L} . Mas sabemos que L^2 comuta com qualquer componente de \mathbf{L} e comuta com H , então para resolver este problema vamos considerar um estado que seja autoestado de L^2 , L_z e H . Estes três operadores formam um conjunto completo de operadores comutáveis e escolha de L_z fazer parte deste conjunto foi feita por conveniência, já que poderíamos ter escolhido qualquer outra componente de \mathbf{L} de modo que a construção que faremos posteriormente permaneça com as mesmas conclusões físicas.

Vimos na seção 2.2 que podemos escrever momento angular de forma geral utilizando a notação \mathbf{J} , em que \mathbf{J} contém informações tanto de momento angular orbital quanto do que chamamos de momento de spin. Na seção 2.1, vimos também que os geradores dos grupos $SO(3)$ e $SU(2)$ satisfazem uma álgebra idêntica ao operador de momento angular orbital que construímos nesta seção. Assim, se quisermos falar de spin na mecânica quântica, devemos considerar um operador \mathbf{S} que satisfaça a mesma álgebra de comutadores que \mathbf{L} . Dito isso, seguindo a notação utilizada na seção 2.2, vamos construir a teoria de momento angular na mecânica quântica utilizando a notação \mathbf{J} e J^2 , em que \mathbf{J} é um observável que pode conter informações de momento angular orbital, ou de spin, ou mesmo uma combinação dos dois. Antes de iniciarmos a construção da teoria geral de momento angular, faz-se necessário definir novos operadores J_+ e J_- , que são nada mais que combinações lineares das projeções de \mathbf{J} nas direções x e y, em outras palavras

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad \text{e} \quad J_- = J_x - iJ_y. \quad (2.42)$$

É importante notar que estes novos operadores não são hermitianos e que um é o adjunto do outro. Com esta definição, também é importante sabermos como funcionam as relações de comutação destes operadores com os operadores J_z e J^2 , bem como entre si. Calculando, primeiramente, o comutador de J_z com J_+ e J_- , temos

$$\begin{aligned} [J_z, J_{\pm}] &= [J_z, J_x \pm iJ_y] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] \\ &= i\hbar J_y \pm \hbar J_x = \pm \hbar(J_x \pm iJ_y) \\ &= \pm \hbar J_{\pm}. \end{aligned} \tag{2.43}$$

Vemos então que o comutador J_z com J_{\pm} é um múltiplo do respectivo J_{\pm} . Agora, calculando o comutador de J_+ e J_- , temos

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] \\ &= \hbar J_z + \hbar J_z = 2\hbar J_z. \end{aligned} \tag{2.44}$$

Por fim, calculando o comutador de J^2 com J_+ e J_- , temos

$$\begin{aligned} [J^2, J_{\pm}] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_{\pm}] = [J_x^2, J_{\pm}] + [J_y^2, J_{\pm}] + [J_z^2, J_{\pm}] \\ &= \pm i[J_x^2, J_y] + [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_{\pm}] \\ &= \pm i(J_x[J_x, J_y] + [J_x, J_y]J_x) + J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y + J_z[J_z, J_{\pm}] + [J_z, J_{\pm}]J_z \\ &= \pm i(i\hbar J_x J_z + i\hbar J_z J_x) - i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y \pm \hbar J_z J_{\pm} \pm \hbar J_{\pm} J_z \\ &= \mp \hbar(J_x J_z \pm iJ_y J_z) \mp \hbar(J_z J_x \pm iJ_z J_y) \pm \hbar J_z J_{\pm} \pm \hbar J_{\pm} J_z \\ &= \mp \hbar J_{\pm} J_z \mp \hbar J_z J_{\pm} \pm \hbar J_z J_{\pm} \pm \hbar J_{\pm} J_z \\ &= 0. \end{aligned} \tag{2.45}$$

De posse dos resultados evidenciados em (2.43), (2.44) e (2.45), temos quase todo o necessário para construir matematicamente a teoria geral de momento angular na mecânica quântica. Por último, vamos obter a expressão de J^2 em termos dos operadores J_+ , J_- e J_z . Para isto, devemos calcular diretamente os produtos $J_+ J_-$ e $J_- J_+$. Temos então que:

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i(J_y J_x - J_x J_y) \\ &= J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \end{aligned} \tag{2.46}$$

e

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i(J_x J_y - J_y J_x) \\ &= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z. \end{aligned} \tag{2.47}$$

Somando os resultados em (2.46) e (2.47) e isolando em termos de J^2 , temos

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2. \quad (2.48)$$

Agora que temos o necessário, vamos dar início a construção do formalismo. Como dito anteriormente, precisamos de uma base de autokets simultâneos de J^2 , J_z e H , nesse sentido consideremos a base que satisfaz as seguinte equações de autovalores

$$\begin{aligned} J^2 |\lambda, m\rangle &= \lambda \hbar^2 |\lambda, m\rangle, \\ J_z |\lambda, m\rangle &= m \hbar |\lambda, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Notemos que a constante de Planck \hbar possui dimensão de momento angular, de modo que λ e m são valores adimensionais. Agora, vamos mostrar algumas propriedades importantes dos autovalores de J^2 e J_z , são elas:

I. Se $\lambda \hbar^2$ é autovalor de J^2 , então $\lambda \geq 0$ e $\lambda = j(j+1)$, com $j \geq 0$.

Prova: Consideremos um ket $|\psi\rangle$ arbitrário e calculemos o valor médio de J^2 . Assim

$$\begin{aligned} \langle \psi | J^2 | \psi \rangle &= \langle \psi | J_x^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_y^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle \\ &= ||J_x | \psi \rangle||^2 + ||J_y | \psi \rangle||^2 + ||J_z | \psi \rangle||^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Desse modo, como o valor médio de J^2 é maior ou igual a zero para qualquer $|\psi\rangle$, então isso obriga que os autovalores de J^2 sejam maiores ou iguais a zero. Devido ao resultado em (2.50), uma forma mais conveniente de escrever os autovalores de J^2 sem perder a generalidade da construção. Para isso iremos trocar λ por $j(j+1)$ e impor que $j \geq 0$ para manter propriedade I satisfeita, de modo que as equações de autovalores se tornam

$$\begin{aligned} J^2 |j, m\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle; \\ J_z |j, m\rangle &= m \hbar |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

II. Se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são autovalores de J^2 e J_z , respectivamente, associados com o mesmo autoket $|j, m\rangle$, então a desigualdade $-j \leq m \leq j$ é satisfeita para j e m .

Prova: Consideremos os kets $J_+ |j, m\rangle$ e $J_- |j, m\rangle$ e calculemos a norma ao quadrado destes vetores, assim

$$\begin{aligned} ||J_+ |j, m\rangle||^2 &= \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle \geq 0; \\ ||J_- |j, m\rangle||^2 &= \langle j, m | J_+ J_- |j, m\rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Assumindo que os autokets são devidamente ortonormais, podemos calcular diretamente o lado esquerdo da desigualdade de cada equação. Portanto, temos

$$\begin{aligned}
 \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | j, m \rangle \\
 &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \geq 0 \\
 &= j(j+1) - m(m+1) \geq 0 \\
 &= (j-m)(j+m+1) \geq 0;
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

$$\begin{aligned}
 \langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z | j, m \rangle \\
 &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \geq 0 \\
 &= j(j+1) - m(m-1) \geq 0 \\
 &= (j+m)(j-m+1) \geq 0.
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Para que as desigualdades em (2.53) e (2.54) sejam satisfeitas, as condições que j e m devem obedecer as seguintes condições simultaneamente

$$\begin{aligned}
 &- (j+1) \leq m \leq j; \\
 &- j \leq m \leq j+1.
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Isto só vai ocorrer no caso em que $-j \leq m \leq j$.

- III. Se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são autovalores de J^2 e J_z , respectivamente, associados com o mesmo autoket $|j, m\rangle$, então, para $m = -j$, $J_-|j, -j\rangle = 0$ e para $m > -j$, $J_-|j, m\rangle$ é um autovetor não nulo de J^2 e J_z com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-1)\hbar$, respectivamente.

Prova: Se $m = -j$, temos

$$\langle j, -j | J_+ J_- | j, -j \rangle = (j-j)(j+j+1) = 0. \tag{2.56}$$

De modo que a norma ao quadrado de um vetor só é zero se o vetor em questão é o vetor nulo. Agora, se $m > -j$, temos

$$[J^2, J_-] |j, m\rangle = 0 \implies J^2 J_- |j, m\rangle = J_- J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_- |j, m\rangle \tag{2.57}$$

e

$$\begin{aligned}
 [J_z, J_-] |j, m\rangle &= -\hbar J_- |j, m\rangle \\
 J_z J_- |j, m\rangle &= J_- J_z |j, m\rangle - \hbar J_- |j, m\rangle \\
 &= (m-1)\hbar J_- |j, m\rangle.
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Assim, vemos que o vetor $J_-|j, m\rangle$ é autovetor de J^2 e J_z com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-1)\hbar$, como queríamos demonstrar.

IV. Se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são autovalores de J^2 e J_z , respectivamente, associados com o mesmo autoket $|j, m\rangle$, então, para $m = j$, $J_+|j, j\rangle = 0$ e para $m < j$, $J_+|j, m\rangle$ é um autovetor não nulo de J^2 e J_z com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m+1)\hbar$, respectivamente.

Prova: Se $m = j$, temos

$$\langle j, j | J_- J_+ | j, j \rangle = (j-j)(j+j+1) = 0. \quad (2.59)$$

De modo que a norma ao quadrado de um vetor só é zero se o vetor em questão é o vetor nulo. Agora, se $m < j$, temos

$$[J^2, J_+] |j, m\rangle = 0 \implies J^2 J_+ |j, m\rangle = J_+ J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_+ |j, m\rangle \quad (2.60)$$

e

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] |j, m\rangle &= \hbar J_+ |j, m\rangle \\ J_z J_+ |j, m\rangle &= J_+ J_z |j, m\rangle + \hbar J_+ |j, m\rangle \\ &= (m+1)\hbar J_+ |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Assim, vemos que o vetor $J_+|j, m\rangle$ é autovetor de J^2 e J_z com autovalores $j(j+1)\hbar^2$ e $(m+1)\hbar$, como queríamos demonstrar.

A partir de todas essas propriedades é possível concluir que, se $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$ são autovalores de J^2 e J_z associados com o mesmo autoket $|j, m\rangle$, então, os possíveis valores de j são inteiros ou semi-inteiros positivos ($0, 1/2, 1, \dots$) e, para um dado valor de j , existem $2j+1$ valores possíveis para m que diferem de números inteiros um do outro (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2019). Para finalizar a teoria geral de momento angular, precisamos entender como se dá a construção da base que descreve um determinado sistema físico com momento angular associado, em outras palavras, precisamos ainda descrever a aplicação dos operadores J_+ e J_- nos kets $|j, m\rangle$. Sabemos pela equação (2.58) que $J_-|j, m\rangle$ está relacionado com o ket $|j, m-1\rangle$ pois o autovalor associado ao operador J_z é $(m-1)\hbar$. Portanto, a melhor forma de determinar esta relação é calculando a norma ao quadrado de $J_-|j, m\rangle$. Assim, temos

$$\|J_-|j, m\rangle\|^2 = \|\lambda_-|j, m-1\rangle\|^2 \implies |\lambda_-|^2 = j(j+1)\hbar^2 - m(m-1)\hbar^2. \quad (2.62)$$

Podemos escolher a fase global da base de momento angular de forma que λ_- seja um número real, que é dado por $\lambda_- = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$. De forma análoga, para saber como o vetor $J_+|j, m\rangle$ se relaciona com o ket $|j, m+1\rangle$, calculemos a norma ao quadrado de $J_+|j, m\rangle$.

Assim, temos

$$\|J_+|j, m\rangle\|^2 = \|\lambda_+|j, m+1\rangle\|^2 \implies |\lambda_+|^2 = j(j+1)\hbar^2 - m(m+1)\hbar^2. \quad (2.63)$$

Da mesma forma que no caso anterior, podemos escolher a fase global da base de momento angular de forma que λ_+ seja um número real, que é dado por $\lambda_+ = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$. Em resumo, com as expressões

$$\begin{aligned} J^2 |j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle, \\ J_z |j, m\rangle &= m\hbar |j, m\rangle, \\ J_+ |j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \\ J_- |j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \end{aligned} \tag{2.64}$$

e sabendo que a base formada pelo conjunto dos kets $\{|j, m\rangle\}$ é ortonormal e, portanto, satisfaz as seguintes relações de ortonormalidade e completeza

$$\begin{aligned} \langle j', m' | j, m \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \\ \sum_j \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| &= \mathbb{1} \end{aligned} \tag{2.65}$$

podemos construir a representação de momento angular para qualquer j e m permitidos, ou seja, podemos determinar a representação matricial dos operadores J^2 , J_x , J_y , J_z , J_+ e J_- . Para exemplificar, vamos mostrar a representação matricial para os casos de $j = \frac{1}{2}$ e $j = 1$. De forma geral, se temos uma base $\{|u_i\rangle\}$ e um operador A os elementos de matrizes deste operador são calculados da seguinte forma

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = A_{ij}. \tag{2.66}$$

Para o caso de $j = \frac{1}{2}$:

$$J_z^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (J^2)^{(1/2)} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \tag{2.67}$$

$$J_+^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_-^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \tag{2.68}$$

$$J_x^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_y^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.69}$$

Agora, para o caso de $j = 1$:

$$J_z^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (J^2)^{(1)} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \tag{2.70}$$

$$J_+^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_-^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

$$J_x^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_y^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.72)$$

Com estes exemplos fica claro como podemos replicar os cálculos para qualquer valor permitido de j , completando, assim, a construção do formalismo geral de momento angular para a mecânica quântica.

2.4 Aplicação de momento angular orbital na mecânica quântica

Em muitos contextos é interessante trabalhar em casos de partículas sem spin. Nesse sentido é útil estender o desenvolvimento matemático do momento angular orbital no contexto da mecânica quântica. Nesta seção iremos nos aprofundar no caso particular de partículas sem spin. Veremos como o que já foi desenvolvido da teoria geral de momento angular se aplica neste caso.

No início da seção 2.3 definimos momento angular orbital em termos dos operadores de posição e momento em (2.28). Mantendo esta definição, podemos reescrever a equação (2.29) em termos do espaço de posição. Temos então que

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{e} \quad L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.73)$$

Quando falamos de momento angular orbital nos vem a ideia de um corpo orbitando um outro corpo realizando uma rotação. Portanto, é mais conveniente trabalharmos com momento angular orbital escrito em coordenadas esféricas (ou polares). Definimos as coordenadas esféricas da seguinte forma:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi, \\ y = r \sin \theta \sin \phi, \\ z = r \cos \theta. \end{cases} \quad (2.74)$$

Utilizando então as técnicas de mudanças de coordenadas, podemos reescrever as componentes do momento angular orbital em coordenadas esféricas, obtendo o seguinte

$$L_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad L_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad \text{e} \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

(2.75)

Com a expressão das componentes de \mathbf{L} , podemos escrever o operador L^2 em termos das coordenadas esféricas. Temos então que

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right). \quad (2.76)$$

É importante pontuar que, no sistema de coordenadas esféricas, tanto as componentes de \mathbf{L} quanto L^2 não possuem dependência na parte radial. Isto é importante, pois significa que só momento angular orbital não é suficiente para descrever o sistema completamente, sendo necessário alguma informação adicional. Esta informação adicional é dada pela energia do sistema, como discutimos na seção 2.3. Com isto, temos o necessário para especificar a forma da parte angular da função de onda no espaço das posições. Como a parte radial é determinada pela hamiltoniana do sistema, que por sua vez depende do sistema físico que estaremos tratando, vamos nos restringir a determinar a expressão da parte angular da função de onda. Para isso, precisamos resolver as seguintes equações diferenciais:

$$\begin{cases} - \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = l(l+1)\psi_{l,m}(r, \theta, \phi), \\ -i \frac{\partial}{\partial\phi} \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = m\psi_{l,m}(r, \theta, \phi). \end{cases} \quad (2.77)$$

A equação (2.77) pode ser escrita em termos dos operadores L^2 e L_z , de modo que obtemos a equação de autovalor destes operadores no formato da equação (2.51). Sendo assim, temos

$$\begin{cases} L^2 \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 \psi_{l,m}(r, \theta, \phi), \\ L_z \psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = m\hbar \psi_{l,m}(r, \theta, \phi). \end{cases} \quad (2.78)$$

Notemos que na equação (2.77) os termos das diferenciais não dependem de r , portanto podemos considerar r um parâmetro constante e resolver a equação diferencial somente em termos de θ e ϕ . Para isso utilizaremos o método de separação de variáveis, quebrando a função de onda $\psi_{l,m}(r, \theta, \phi)$ em 3 funções dependentes somente de uma das variáveis. Logo, temos que

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi). \quad (2.79)$$

A junção das funções $\Theta_{l,m}(\theta)$ e $\Phi_m(\phi)$ nos retorna a função que é comumente conhecida como harmônicos esféricos, dada por

$$Y_l^m(\theta, \phi) = c_{l,m}\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi). \quad (2.80)$$

Resolvendo primeiramente a equação diferencial com dependência somente em ϕ , chegamos no seguinte

$$-i \frac{d}{d\phi} \Phi_m(\phi) = m \Phi_m(\phi). \quad (2.81)$$

A solução da equação (2.81) é dada por uma exponencial dependente de ϕ da seguinte forma

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}. \quad (2.82)$$

Nesta solução foi omitida a constante de normalização, pois iremos juntar as constantes dentro da constante $c_{l,m}$. Agora, devido a simetria e periodicidade do problema, $\Phi_m(\phi)$ deve possuir os valores idênticos nos extremos 0 e 2π . Com esta condição restringimos os valores possíveis de m . Portanto,

$$\Phi_m(0) = \Phi_m(2\pi) \implies e^{2im\pi} = 1. \quad (2.83)$$

Vimos na seção anterior que m só assume valores inteiros ou semi-inteiros e, para satisfazer a condição na equação (2.82), m deve ser necessariamente inteiro. Também vimos na seção 2.3 que m está em um intervalo de $-l$ a l , de modo que se m é inteiro, l também será necessariamente inteiro. Agora que resolvemos a equação diferencial equivalente a equação de autovalor do operador L_z , falta apenas resolver a equação diferencial equivalente a equação de autovalor do operador L^2 para obter de forma completa a expressão dos harmônicos esféricos. Para resolver a equação diferencial em termos de θ , vamos reescrever a equação diferencial em uma forma mais conveniente, dada por

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_{l,m}(\theta) \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{l,m}(\theta) = 0. \quad (2.84)$$

Nesta forma, a equação diferencial se torna a conhecida equação diferencial associada de Legendre (Arfken *et al.*, 2011), cuja as soluções são proporcionais aos polinômios associados de Legendre em termos de $\cos \theta$, ou seja, $c_{l,m} P_l^m(\cos \theta)$, em que $c_{l,m}$ é a constante de normalização. A expressão dos polinômios associados de Legendre em função do $\cos \theta$ é dada por

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}. \quad (2.85)$$

Com a equação (2.85), obtemos a forma praticamente completa dos harmônicos esféricos. Nos resta somente determinar as constantes de normalização $c_{l,m}$. Normalizando, temos

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(Y_{l'}^{m'})^* \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (2.86)$$

Para resolver esta integral, iremos resolver separadamente as integrais em ϕ e em θ . Dito isso, vamos considerar primeiramente a parte em ϕ , assim

$$\int_0^{2\pi} e^{im\phi} e^{-im'\phi} d\phi = 2\pi\delta_{m,m'}, \quad (2.87)$$

onde a delta de kronecker indica que este termo é zero para $m \neq m'$. Por fim, para calcular a parte em θ utilizaremos as propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Legendre (Arfken *et al.*, 2011). Portanto, temos

$$|c_{l,m}|^2 \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = |c_{l,m}|^2 \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{l,l'}. \quad (2.88)$$

Combinando os resultados nas equações (2.87) e (2.88) e comparando com (2.86), conseguimos determinar a constante de normalização, que é dada por

$$c_{l,m} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}. \quad (2.89)$$

Assim, combinando as expressões (2.82), (2.85) e (2.89), obtemos a expressão geral dos harmônicos esféricos, dada por

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (2.90)$$

Em suma, tudo que foi apresentado até aqui serve de base teórica para as construções que serão apresentadas nos capítulos 3 e 4, de modo que finalizamos o capítulo 2.

3 FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Neste capítulo pretendo fazer uma construção teórica do formalismo do PDTO para o caso tridimensional, de modo que seja possível utilizar os conceitos aqui abordados para embasar a construção de um formalismo semelhante que envolva o operador de rotação em torno do eixo z . Para isto, será necessário mostrar a forma da equação de Schrödinger em um sistema de coordenadas polares modificadas, bem como estender a ideia do formalismo do *PDTO* para obter o que seria o operador de momento angular orbital generalizado na direção z , de modo que seja possível aplicá-lo na solução do problema do rotor quântico fixo bidimensional no capítulo seguinte.

3.1 Espaço de hilbert modificado em 3 dimensões

Seja um espaço de Riemann tridimensional com uma métrica diagonal (Braga, 2015), dado por

$$ds^2 = g_{11}(x, y, z)dx^2 + g_{22}(x, y, z)dy^2 + g_{33}(x, y, z)dz^2, \quad (3.1)$$

onde, a priori, g_{ii} , com $i = 1, 2, 3$, são funções quaisquer dependentes das coordenadas x , y e z . O elemento de volume dV é, então

$$dV = \sqrt{\det(g_{ij})}dxdydz. \quad (3.2)$$

O espaço das funções de onda será um espaço de Hilbert das funções de x , y e z definidas em um volume V , tal que

$$\iiint_V |\psi(x, y, z)|^2 dV < \infty, \quad (3.3)$$

onde dV é dado por (3.2). Tal espaço de Hilbert é munido de um produto interno, definido como

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \iiint_V \phi^*(x, y, z)\psi(x, y, z)dV = \iiint_V \phi^*(x, y, z)\psi(x, y, z)\sqrt{\det(g_{ij}(x, y, z))}dxdydz, \quad (3.4)$$

onde $\phi^*(x, y, z)$ e $\psi(x, y, z)$ são $\langle \phi | x, y, z \rangle$ e $\langle x, y, z | \psi \rangle$, respectivamente. Agora, consideremos uma partícula bem localizada na posição $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$. Tal partícula é descrita através de $|\vec{r}\rangle$,

$$|\vec{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle. \quad (3.5)$$

De (3.4), podemos determinar a relação de completeza da seguinte forma

$$\begin{aligned} \iiint_V \phi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) dV &= \iiint_V \langle \phi | x, y, z \rangle \langle x, y, z | \psi \rangle \sqrt{\det(g_{ij}(x, y, z))} dx dy dz \\ &= \langle \phi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.6)$$

de modo que

$$\mathbb{1} = \iiint_V |x, y, z\rangle \langle x, y, z| \sqrt{\det(g_{ij}(x, y, z))} dx dy dz. \quad (3.7)$$

Podemos, também, determinar a relação de ortogonalidade dos kets $|x, y, z\rangle$ e $|x', y', z'\rangle$ utilizando a definição de $\psi(x, y, z)$, logo

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \langle x, y, z | \psi \rangle = \iiint_V \langle x, y, z | x', y', z' \rangle \langle x', y', z' | \psi \rangle \sqrt{\det(g_{ij}(x', y', z'))} dx' dy' dz' = \\ &= \iiint_V \langle x, y, z | x', y', z' \rangle \psi(x', y', z') \sqrt{\det(g_{ij}(x', y', z'))} dx' dy' dz'. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Assim, podemos ver que o termo $\langle x, y, z | x', y', z' \rangle \sqrt{\det(g_{ij}(x', y', z'))}$ deve ser igual a $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$.

Com isso, podemos utilizar a propriedade de filtragem das deltas de dirac e obtermos o lado esquerdo de (3.8). Dessa forma o produto escalar é simplesmente

$$\langle x, y, z | x', y', z' \rangle = \det(g_{ij}(x', y', z'))^{-\frac{1}{2}} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.9)$$

Com isso, podemos escrever um determinado estado físico $|\psi\rangle$ em termos da base de posição $|\vec{r}\rangle$ da seguinte forma

$$|\psi\rangle = \iiint_V |x, y, z\rangle \psi(x, y, z) \sqrt{\det(g_{ij})} dx dy dz. \quad (3.10)$$

Consideremos agora os operadores de posição X_i , com $i = 1, 2, 3$. A atuação de X_i em um ket $|x, y, z\rangle$ se dá da seguinte forma

$$X_i |x, y, z\rangle = x_i |x, y, z\rangle, \quad (3.11)$$

onde X_i representa os operadores de posição nas direções x, y e z, e x_i seus respectivos autovalores, seguindo a ordem numérica no índice. Vamos mostrar que este conjunto de operadores forma um conjunto completo de observáveis compatíveis nesse espaço, para isto é necessário mostrar

que $[X_i, X_j] = 0$, então

$$\begin{aligned}
 \langle x, y, z | [X_i, X_j] |\psi \rangle &= \langle x, y, z | [X_i, X_j] \mathbb{1} |\psi \rangle \\
 &= \iiint_{V'} \langle x, y, z | [X_i, X_j] |x', y', z' \rangle \langle x', y', z' | \psi \rangle dV' \\
 &= \iiint_{V'} \langle x, y, z | (X_i X_j - X_j X_i) |x', y', z' \rangle \langle x', y', z' | \psi \rangle dV' \\
 &= \iiint_{V'} \langle x, y, z | (x'_i x'_j - x'_j x'_i) |x', y', z' \rangle \langle x', y', z' | \psi \rangle dV',
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

o termo $(x'_i x'_j - x'_j x'_i)$ é identicamente zero, de modo que o lado direito da equação é zero. Portanto,

$$[X_i, X_j] = 0, \tag{3.13}$$

deve ser satisfeita do lado esquerdo, de modo que os operadores X_i formam um conjunto de operadores compatíveis. Agora, queremos um operador de translação espacial que atue em um ket $|x, y, z\rangle$ deste espaço tridimensional da seguinte forma

$$T_g(d\vec{r})|\vec{r}\rangle = \left| x + g_{11}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dx, y + g_{22}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dy, z + g_{33}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dz \right\rangle, \tag{3.14}$$

onde $d\vec{r} = dx\hat{x} + dy\hat{y} + dz\hat{z}$. Notemos da equação 3.1 que

$$d\vec{s} = \sqrt{g_{11}(x, y, z)}dx\hat{x} + \sqrt{g_{22}(x, y, z)}dy\hat{y} + \sqrt{g_{33}(x, y, z)}dz\hat{z}. \tag{3.15}$$

Realizando então um translação de uma distância $d\vec{s}$ no ket $|\vec{r}\rangle$, temos

$$T_g(d\vec{s})|\vec{r}\rangle = |x + dx, y + dy, z + dz\rangle. \tag{3.16}$$

Utilizando (3.14) podemos calcular a relação de comutação entre os operadores de posição e o operador de translação. Calculando, obtemos que

$$\begin{aligned}
 [X_i, T_g(d\vec{r})]|x, y, z\rangle &= X_i \left| x + g_{11}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dx, y + g_{22}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dy, z + g_{33}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dz \right\rangle \\
 &\quad - T_g(d\vec{r})x_i|x, y, z\rangle \\
 &\simeq (x_i + g_{ii}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dx_i - x_i)|x, y, z\rangle = g_{ii}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dx_i|x, y, z\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

ou seja,

$$[X_i, T_g(d\vec{r})] = g_{ii}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z)dx_i. \tag{3.18}$$

Como o momento é um gerador de translação, podemos escrever o operador $T_g(d\vec{r})$ como

$$T_g(d\vec{r}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{P}_g d\vec{r}. \quad (3.19)$$

Podemos utilizar (3.19) para obter a expressão de \vec{P}_g neste espaço de posição. Assim, temos

$$\begin{aligned} T_g(\delta\vec{s}) |\psi\rangle &= \iiint_{V'} T_g(\delta\vec{s}) |x', y', z'\rangle \langle x', y', z'|\psi\rangle dV' \\ &= \iiint_{V'} |x' + dx, y' + dy, z' + dz\rangle \langle x', y', z'|\psi\rangle dV' \\ &= \iiint_{V'} |x', y', z'\rangle \langle x' - dx, y' - dy, z' - dz|\psi\rangle dV' \\ &\simeq \iiint_{V'} |x', y', z'\rangle \left(\psi(x', y', z') - \vec{\nabla}_g \psi(x', y', z') \delta\vec{s} \right) dV'. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Notemos que, neste espaço o operador $\vec{\nabla}_g$ é escrito como

$$\vec{\nabla}_g = \sum_{i=1}^3 g_{ii}^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x_i} \hat{x}_i, \quad (3.21)$$

pois estamos em um espaço diferente do euclidiano. Agora, utilizando (3.19), podemos escrever

$$\langle x, y, z | T_g(\delta\vec{s}) |\psi\rangle = \langle x, y, z | \psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle x, y, z | \vec{P}_g |\psi\rangle \delta\vec{s}. \quad (3.22)$$

Aplicando $\langle x, y, z |$ em (3.20) e comparando com (3.22), vemos que

$$\langle x, y, z | \vec{P}_g |\psi\rangle = -i\hbar \vec{\nabla}_g \langle x, y, z | \psi\rangle. \quad (3.23)$$

Portanto, vemos que a representação do momento que gera a translação considerando o formalismo do PDTO neste espaço de posição é dado pelo gradiente em coordenadas generalizadas multiplicado pelo fator $-i\hbar$. A partir de (3.23), podemos obter as expressões de cada componente de \vec{P}_g no espaço das posições, assim

$$P_x = -i\hbar g_{11}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x}, P_y = -i\hbar g_{22}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial y} \text{ e } P_z = -i\hbar g_{33}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.24)$$

Combinando (3.18) e (3.19), podemos obter a relação de comutação de cada componente do operador de posição com uma componente do operador de momento generalizado, ou seja,

$$[X_i, P_j] = i\hbar g_{ii}^{-\frac{1}{2}}(x, y, z) \delta_{ij}. \quad (3.25)$$

Neste espaço, definimos o operador Hamiltoniano em termos de \vec{P}_g da seguinte forma

$$H_g = \frac{P_g^2}{2m} + V(X, Y, Z), \quad (3.26)$$

e como possuímos a expressão de \vec{P}_g em termos do espaço de posição, podemos escrever a equação de Schrödinger modificada, dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{\det(g_{ii})}} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{\det(g_{ii})} g_{ii}^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + V(x, y, z) \right] \Psi, \quad (3.27)$$

com $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ e assumindo que o potencial não depende do tempo. Vejamos que a equação (3.27) é a conhecida equação de Laplace-Beltrami utilizada na literatura no contexto de espaços curvos (LAPLACE-BELTRAMI equation. In: ENCYCLOPEDIA of mathematics, 2020). Ademais, no caso mais geral possível translações não comutam devido a métrica ter dependência em x, y e z, o que nos leva a relação

$$[P_i, P_j] \neq 0. \quad (3.28)$$

Contudo, para o caso em que $g_{11} = g_{11}(x)$, $g_{22} = g_{22}(y)$ e $g_{33} = g_{33}(z)$, as translações comutam e portanto as componentes dos momentos também comutam.

3.2 Equação de Schrödinger modificada em Coordenadas Polares

Para o caso das coordenadas polares, o sistema deve ser de 2 dimensões, portanto será necessário adaptar a equação de Schrödinger modificada que foi obtida na seção anterior para o equivalente bidimensional. Dessa forma a equação se torna

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\sum_{i=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\det(g_{ii})}} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{\det(g_{ii})} g_{ii}^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + V(x, y) \right] \Psi, \quad (3.29)$$

com $\Psi = \Psi(x, y, t)$. Tomando a substituição $\Psi(x, y, t) = e^{\frac{i}{\hbar} Et} \varphi(x, y)$, podemos reescrever (3.29) como

$$E\varphi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\sum_{i=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\det(g_{ii})}} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{\det(g_{ii})} g_{ii}^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + V(x, y) \right] \varphi. \quad (3.30)$$

Para o caso de coordenadas polares, $\varphi(x, y) = \psi(r, \phi)$, consideraremos a seguinte métrica

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (\frac{r}{f})^2 \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

com $f \equiv f(r, \phi)$ sendo, a priori, uma função positiva e não singular qualquer. Nesta métrica, a equação de Schrödinger modificada se torna

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{f}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r, \phi) - E) \right] \psi = 0. \quad (3.32)$$

3.3 Operador de momento angular orbital na direção z no formalismo do *PDTO*

De acordo com o que foi visto no capítulo 2, rotações em mecânica quântica são descritas pelos operadores de momento angular. Utilizando as ideias discutidas na seção 3.1, vamos propor como deve ser a generalização do operador momento angular no formalismo do *PDTO*. Para o que iremos desenvolver nesse trabalho, vamos nos restringir a rotações em torno do eixo z , visto que no capítulo seguinte resolveremos o caso bidimensional do rotor quântico fixo. Dito isso, suponhamos que exista um estado $\Psi(r, \phi)$ que possa ser alterado para um estado $\Psi(r, \phi + f(\phi)d\phi)$ por meio de uma rotação em torno do eixo z . O operador de rotação generalizado na direção z deve ter a seguinte forma

$$\mathcal{R}_z(d\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} L_z^{(g)} d\phi, \quad (3.33)$$

onde $L_z^{(g)}$ é o operador de momento angular generalizado que gera tal rotação. Em coordenadas polares, o operador de momento angular orbital na direção z é escrito em termos de uma derivada na direção ϕ , como representado na equação (2.75). Então, é esperado que seja possível escrever o operador $L_z^{(g)}$ em termos de uma derivada na direção ϕ mas com modificações análogas as que foram feitas nos operadores de momento linear na seção 3.1. Nesse sentido, $L_z^{(g)}$ deve possuir a seguinte expressão em termos das coordenadas (r, ϕ)

$$L_z^{(g)} = -i\hbar f(\phi) \frac{d}{d\phi}. \quad (3.34)$$

Notemos que esta generalização foi considerada mantendo r fixo. Tal consideração foi feita pois é esperado que a expressão do momento angular generalizado não dependa da distância r , apenas da coordenada angular ϕ , de modo que fique de acordo com o momento angular orbital usual. Se considerarmos r fixo ($r = R$) na equação (3.32), os termos com derivadas em relação a r se anulam, de modo que podemos reescrever a equação da seguinte forma

$$\frac{-\hbar^2}{2mR^2} \left[f \frac{d}{d\phi} \left(f \frac{d\Psi}{d\phi} \right) \right] + V(R, \phi)\Psi(R, \phi) = E\Psi(R, \phi). \quad (3.35)$$

Notemos que os termos de derivada em ϕ são idênticos a expressão de $L_z^{(g)}$, de modo que em termos deste operador, a equação de Schrödinger modificada se torna

$$\frac{-\hbar^2}{2mR^2} (L_z^{(g)})^2 \Psi(R, \phi) + V(R, \phi)\Psi(R, \phi) = E\Psi(R, \phi). \quad (3.36)$$

Com isto, finalizamos este capítulo e temos todo o necessário para aplicar no problema do rotor quântico fixo bidimensional.

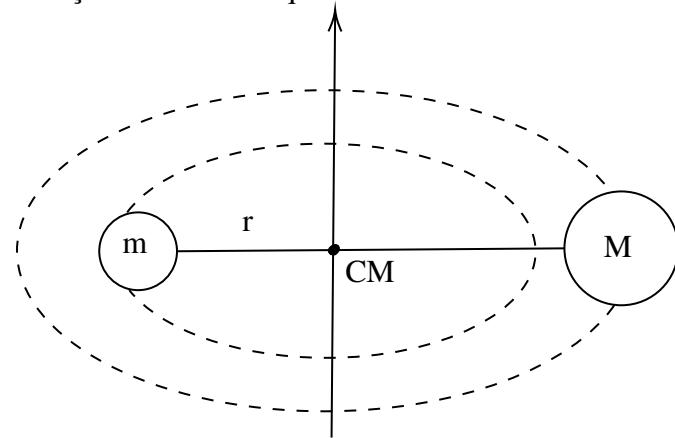
4 RESULTADOS

Neste capítulo iremos fazer uma revisão do problema do rotor quântico fixo bidimensional, bem como propor a versão deste problema no formalismo do *PDTO*. Por fim, iremos analisar, comparar e discutir os resultados obtidos para cada caso.

4.1 Rotor Quântico Fixo bidimensional usual

Considere duas partículas com massas diferentes ligadas de modo que a distância entre elas permaneça fixa. Neste caso, como ilustrado na figura 1 consideraremos que o sistema está restrito a se mover no plano XY , onde m e M são as massas das partículas, CM é o centro

Figura 1 – Representação de um rotor quântico fixo bidimensional utilizando dois corpos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

de massa e r é a distância entre as partículas. Este problema de 2 corpos pode ser substituído por um problema de 1 corpo, como ilustrado na figura 2, utilizando a massa reduzida, ou seja,

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Como neste problema a partícula está livre para rotacionar mantendo R fixo, podemos considerar que o potencial é zero e a hamiltoniana na representação de posição é dada por

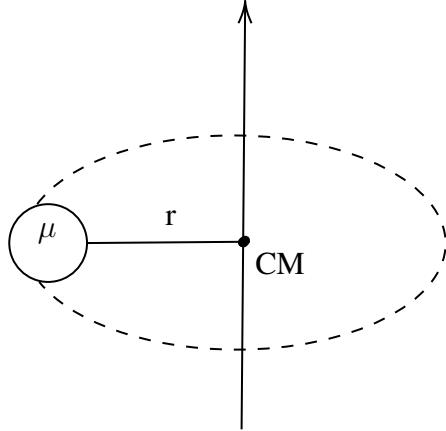
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right). \quad (4.1)$$

Consequentemente a equação de Schrödinger será dada por

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi, \quad (4.2)$$

com $\Psi = \Psi(x, y)$. Contudo, é mais conveniente tratar o problema no sistema de coordenadas

Figura 2 – Representação de um rotor quântico fixo bidimensional utilizando a massa reduzida.



Fonte: Elaborado pelo autor.

polares considerando r fixo, ou seja,

$$\begin{cases} x = R \cos \phi, \\ y = R \sin \phi. \end{cases} \quad (4.3)$$

Neste sistema de coordenadas $\phi \in [0, 2\pi]$. Com esta mudança de coordenadas, o problema se reduz à resolver a equação de Schrödinger dependendo somente de ϕ , devido a coordenada r estar fixada. Assim, a equação de Schrödinger se torna

$$E\Phi = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi, \quad (4.4)$$

agora com $\Phi = \Phi(\phi)$. Definindo $m^2 = \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2}$, podemos reescrever (4.4) como

$$\frac{d^2}{d\phi^2} \Phi + m^2 \Phi = 0. \quad (4.5)$$

A solução geral de (4.5) é dada por

$$\Phi_m(\phi) = A_+ e^{im\phi} + A_- e^{-im\phi}. \quad (4.6)$$

No entanto, no capítulo 2 vimos que a derivada em relação a ϕ está relacionada com o momento angular orbital L_z , devido a forma como a coordenada ϕ é definida. Essa relação é dada por

$$\langle r, \theta, \phi | L_z | \Psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle r, \theta, \phi | \Psi \rangle. \quad (4.7)$$

Vimos também que o operador de momento angular na direção z obedece a seguinte equação de autovalor

$$L_z \Psi(r, \theta, \phi) = m\hbar \Psi(r, \theta, \phi). \quad (4.8)$$

Portanto, devido a (4.8), a solução geral de (4.5) é simplesmente

$$\Phi_m(\phi) = A_+ e^{im\phi}, \quad (4.9)$$

com A_+ sendo uma constante de normalização. Normalizando (4.9), temos

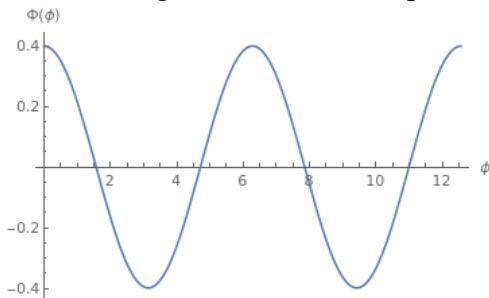
$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\phi)|^2 d\phi = 1 \implies |A_+|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1 \implies A_+ = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (4.10)$$

Assim, a função de onda deste problema é dada por

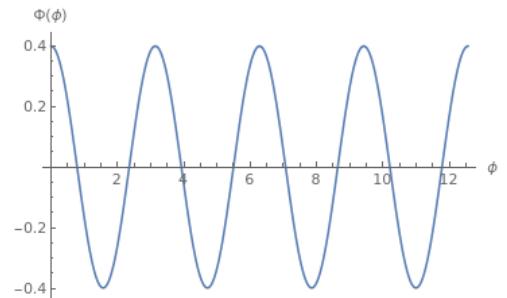
$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (4.11)$$

Pode-se observar que as funções de onda deste problema são todas complexos, exceto quando $m = 0$. Nas figuras 3, 4 e 5, plotamos os gráficos das partes real e imaginária da função de onda para $m = -2, -1, 1, 2$.

Figura 3 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$.



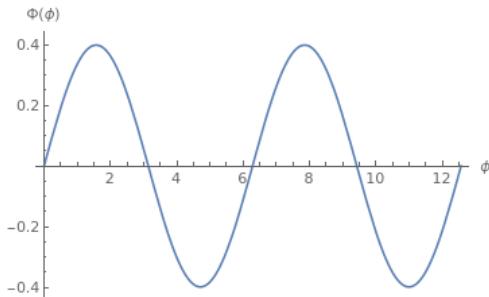
(a) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1$.



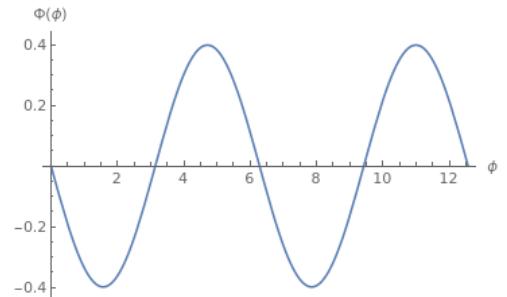
(b) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -2, 2$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 4 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$.



(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 1$.

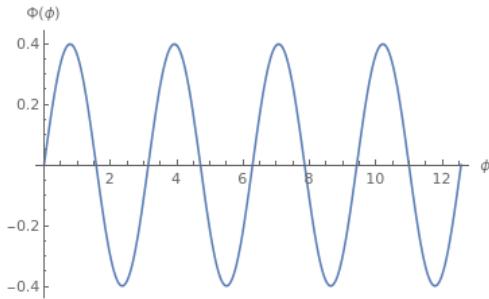


(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -1$.

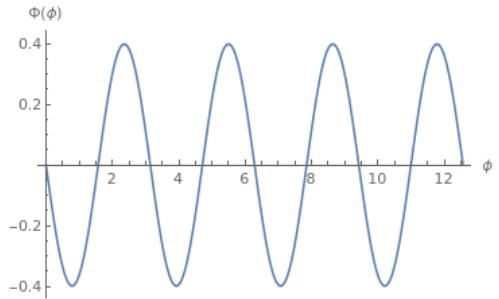
Fonte: Elaborado pelo autor.

Notemos que, devido a paridade da parte real das funções de onda, os gráficos para m 's positivos e negativos são os mesmos de modo que o mesmo gráfico foi utilizado para ambos

Figura 5 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$.



(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 2$.



(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -2$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

os valores como evidenciado na figura 3. O mesmo não ocorre para a parte imaginária, também devido a paridade. Assim, nas figuras 4 e 5, foram colocados lado a lado os gráficos para os m 's positivos e negativos para evidenciar que a diferença entre os gráficos é somente a fase da onda.

Com a função de onda determinada, precisamos agora determinar as autoenergias e para fazer isso precisamos obter os valores de m . Iremos determinar os valores de m utilizando a condição de contorno periódica $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, pois a física do problema indica que o sistema deve ser periódico com período 2π . Assim, temos

$$A_+ e^{im\phi} = A_+ e^{im\phi} e^{im2\pi} \implies e^{im2\pi} = 1. \quad (4.12)$$

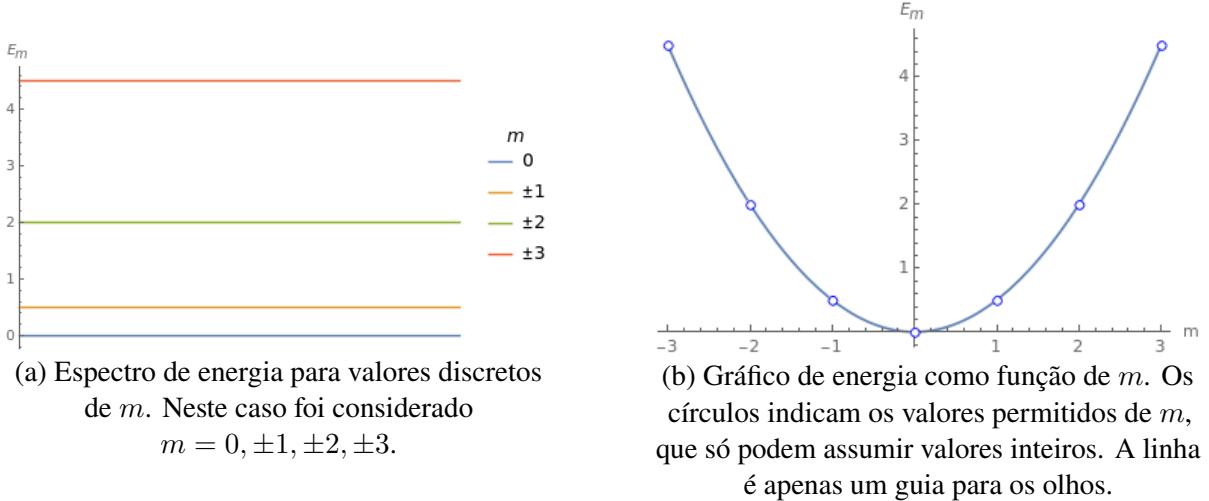
A condição (4.12) só será satisfeita se m for um número inteiro. Como m assume valores inteiros positivos e negativos, podemos interpretar os valores positivos de m como sendo rotações no sentido anti-horário e os valores negativos de m como sendo rotações no sentido horário. Agora que sabemos os valores que m pode assumir, podemos achar os valores de energia, que são

$$m^2 = \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2} \implies E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu R^2}. \quad (4.13)$$

Na figura 6, plotamos os gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.

Com as autoenergias determinadas, podemos observar pela figura 6 que: os níveis de energia são quantizados, a energia do estado fundamental é zero e, para $m \neq 0$, as energias são duplamente degeneradas.

Figura 6 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2 Rotor Quântico Fixo bidimensional no formalismo do PDTO

No formalismo do *PDTO*, o problema anterior seria governado por uma equação de Schrödinger modificada dada por

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\sum_{i=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\det(g_{ii})}} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{\det(g_{ii})} g_{ii}^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \Psi. \quad (4.14)$$

Utilizando a métrica definida em (3.31), a equação de Schrödinger modificada pode ser reescrita como

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{f}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \Psi. \quad (4.15)$$

Contudo, como r é fixo, podemos assumir que $r = R$ e, portanto, tanto $f(r, \phi) = f(R, \phi) = f(\phi)$ como $\Psi(r, \phi) = \Psi(R, \phi) = \Phi(\phi)$, de modo que os termos das derivadas radiais seriam iguais a zero. Assim, podemos reescrever (4.15) como

$$E\Phi = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left[f^2 \frac{d^2}{d\phi^2} + f \frac{df}{d\phi} \frac{d}{d\phi} \right] \Phi. \quad (4.16)$$

Definindo $\lambda^2 = \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2}$, temos que

$$\left[f^2 \frac{d^2}{d\phi^2} + f \frac{df}{d\phi} \frac{d}{d\phi} + \lambda^2 \right] \Phi = 0. \quad (4.17)$$

Notemos que podemos facilitar a solução de (4.17) definindo uma nova variável θ , dada por

$$\theta = \int \frac{d\phi}{f(\phi)} \implies \frac{d\theta}{d\phi} = \frac{1}{f(\phi)}. \quad (4.18)$$

Com esta definição, (4.17) pode ser reescrita como

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \lambda^2 \right] \Phi(\theta) = 0, \quad (4.19)$$

cuja a solução geral é dada por

$$\Phi_\lambda(\theta) = A_+ e^{i\lambda\theta} + A_- e^{-i\lambda\theta}. \quad (4.20)$$

O trabalho agora se resume a resolver a equação diferencial (4.17) para acharmos a função de onda $\Phi(\phi)$ e as autoenergias associadas. Resolveremos para os casos $f(\phi) = 1 + \gamma\phi$ e $f(\phi) = 1 + \gamma \sin \phi$.

4.2.1 Solução para $f(\phi) = 1 + \gamma\phi$:

Após a escolha de $f(\phi)$, a equação (4.17) pode ser reescrita como

$$\left[(1 + \gamma\phi)^2 \frac{d^2}{d\phi^2} + (1 + \gamma\phi)\gamma \frac{d}{d\phi} + \lambda^2 \right] \Phi = 0. \quad (4.21)$$

Utilizando a definição (4.18), podemos reescrever (4.21) no formato da (4.19) em que $\theta(\phi)$ é dado por

$$\theta(\phi) = \frac{\ln(1 + \gamma\phi)}{\gamma}, \quad (4.22)$$

de modo que a solução $\Phi_\lambda(\phi)$ será

$$\Phi_\lambda(\phi) = C_1 e^{i\lambda \frac{\ln(1+\gamma\phi)}{\gamma}}. \quad (4.23)$$

Assim como fizemos na seção 4.1, a coordenada ϕ é definida de tal forma que $\phi \in [0, 2\pi]$ e, portanto, $\theta \in \left[0, \frac{\ln(1+\gamma 2\pi)}{\gamma}\right]$. Vale ressaltar que, como $f(\phi)$ é uma função positiva e não singular, é imposta a restrição de que $\gamma \in [0, \infty)$, ou seja, γ é uma constante positiva ou nula. Ademais, como $f(\phi)$ não é uma função periódica, devemos esperar que as funções de onda $\Phi_\lambda(\phi)$ também não sejam periódicas. Dito isso, a condição de contorno que iremos considerar para determinar o valor de λ será $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$. É importante comentar que esta condição de contorno difere um pouco da condição de contorno periódica, pois neste caso estamos impondo que a função de onda assuma os mesmos valores nos extremos do intervalo na qual ϕ está definido. No caso da condição de contorno periódica, é garantida a periodicidade para um intervalo qualquer no qual ϕ esteja definido. Aplicando a condição de contorno, temos

$$C_1 = C_1 e^{i\lambda \frac{\ln(1+\gamma 2\pi)}{\gamma}} \implies e^{i\lambda \frac{\ln(1+\gamma 2\pi)}{\gamma}} = 1 \implies \lambda \frac{\ln(1 + \gamma 2\pi)}{\gamma} = m2\pi, \text{ com } m \in \mathbb{Z}. \quad (4.24)$$

De (4.24) tiramos que λ deve ser

$$\lambda = \lambda_m = \frac{m\gamma 2\pi}{\ln(1 + \gamma 2\pi)}. \quad (4.25)$$

Portanto, $\Phi_\lambda(\phi) = \Phi_m(\phi)$ é dada por

$$\Phi_m(\phi) = C_1 e^{i2\pi m \frac{\ln(1+\gamma\phi)}{\ln(1+\gamma 2\pi)}}. \quad (4.26)$$

Agora, determinaremos o valor da constante C_1 através da normalização da função de onda $\Phi_m(\phi)$. Normalizando, temos

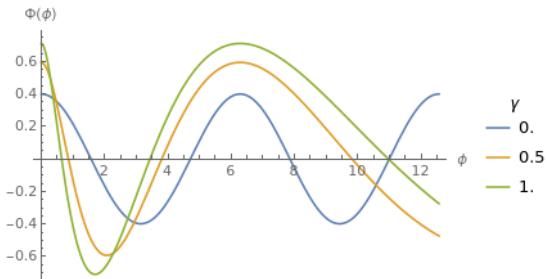
$$\int_0^{2\pi} \frac{|\Phi_m(\phi)|^2}{1 + \gamma\phi} d\phi = |C_1|^2 \frac{\ln(1 + \gamma 2\pi)}{\gamma} = 1 \implies C_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{\ln(1 + \gamma 2\pi)}}. \quad (4.27)$$

Com a constante C_1 determinada, a função de onda pode ser reescrita como

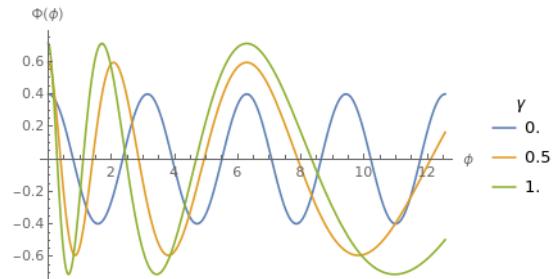
$$\Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{\gamma}{\ln(1 + \gamma 2\pi)}} e^{i2\pi m \frac{\ln(1+\gamma\phi)}{\ln(1+\gamma 2\pi)}}. \quad (4.28)$$

Nas figuras 7, 8 e 9, plotamos os gráficos das partes real e imaginária da função de onda para $m = -2, -1, 1, 2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

Figura 7 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$.



(a) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.



(b) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -2, 2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

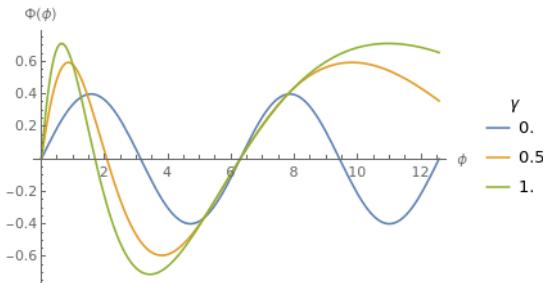
Fonte: Elaborado pelo autor.

Notemos que, devido a paridade da parte real das funções de onda, os gráficos para m 's positivos e negativos são os mesmos de modo que o mesmo gráfico foi utilizado para ambos os valores como evidenciado na Figura 7. O mesmo não ocorre para a parte imaginária, também devido a paridade. Assim, nas Figuras 8 e 9, foram colocados lado a lado os gráficos para os m 's positivos e negativos para evidenciar que a diferença entre os gráficos é somente a fase da onda. Vale ressaltar que para $\gamma = 0$, os gráficos são idênticos aos obtidos na seção 4.1.

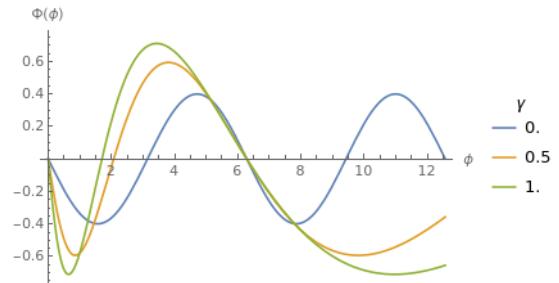
Agora, lembrando que $\lambda^2 = \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2}$ e pela equação (4.25), podemos determinar as autoenergias para este caso. São elas

$$\lambda_m^2 = \frac{2\mu R^2 E_m}{\hbar^2} = \frac{m^2 \gamma^2 4\pi^2}{(\ln(1 + \gamma 2\pi))^2} \implies E_m = \frac{2\pi^2 m^2 \hbar^2 \gamma^2}{\mu R^2 (\ln(1 + \gamma 2\pi))^2}. \quad (4.29)$$

Figura 8 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$.



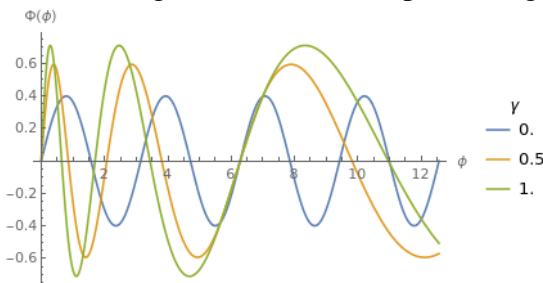
(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 1$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.



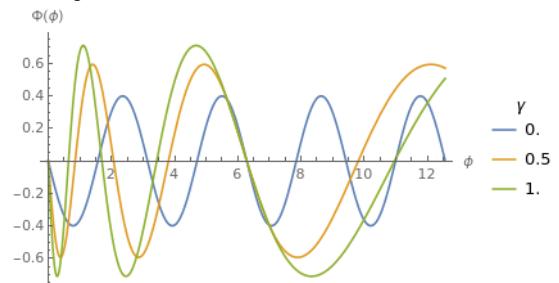
(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -1$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 9 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$.



(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.



(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na figura 10, plotamos os gráficos das energias para $m = -2, -1, 0, 1, 2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

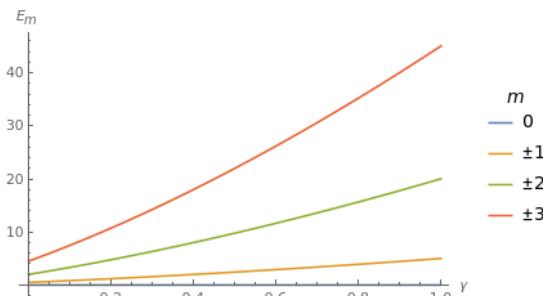
Comparando os resultados nesta seção com os resultados obtidos na seção 4.1, podemos ver que: as autofunções são todas complexas, exceto para $m = 0$, os níveis de energia são quantizados e dependentes de γ , a energia do estado fundamental é zero e, para $m \neq 0$, as energias são duplamente degeneradas. Todos estes resultados são equivalentes aos resultados obtidos na seção 4.1. É importante ressaltar que no limite de $\gamma = 0$, todos os resultados retornam exatamente para os resultados do Rotor Quântico Fixo usual, como pode ser visto pelos gráficos apresentados.

4.2.2 Solução para $f(\phi) = 1 + \gamma \sin \phi$:

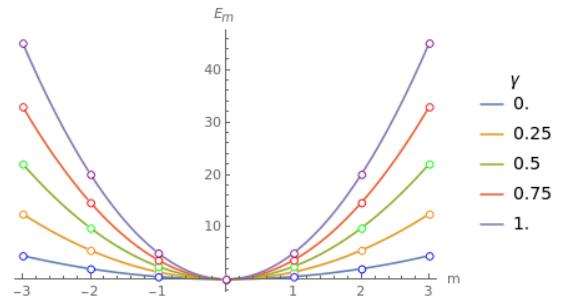
Agora, para esta escolha de $f(\phi)$, a equação 4.17 pode ser escrita como

$$\left[(1 + \gamma \sin \phi)^2 \frac{d^2}{d\phi^2} + (1 + \gamma \sin \phi)\gamma \cos \phi \frac{d}{d\phi} + \lambda^2 \right] \Phi = 0. \quad (4.30)$$

Figura 10 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$.



(a) Espectro de energia para valores discretos de m com dependência do parâmetro γ . Neste caso foi considerado $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.



(b) Gráfico de energia como função de m . Os círculos indicam os valores permitidos de m , que só podem assumir valores inteiros. As linhas são apenas um guia para os olhos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Utilizando a definição (4.18), podemos reescrever (4.30) no formato da (4.19) em que $\theta(\phi)$ é dado por

$$\theta(\phi) = \frac{2}{\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan \left[\frac{\gamma + \tan(\frac{\phi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}} \right], \quad (4.31)$$

de modo que a solução $\Phi_\lambda(\phi)$ será

$$\Phi_\lambda(\phi) = C_2 \exp \left(i \frac{2\lambda}{\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan \left[\frac{\gamma + \tan(\frac{\phi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}} \right] \right). \quad (4.32)$$

Diferentemente de como fizemos nas seções 4.1 e 4.2.1, a coordenada ϕ é definida de tal forma que $\phi \in [-\pi, \pi]$ e, portanto, $\theta \in \left[\frac{-\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}}, \frac{\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}} \right]$. Esta diferença ocorre pelo fato de existir um problema na imagem de $\theta(\phi)$ considerando o domínio de $\phi \in [0, 2\pi]$ devido o termo $\tan(\frac{\phi}{2})$. Vale ressaltar que, como $f(\phi)$ é uma função positiva e não singular, é imposta a restrição de que $\gamma \in (-1, 1)$, ou seja, γ deve ser uma constante positiva, negativa ou nula com os valores máximo e mínimo não estando incluídos. Um resultado notável decorrente da escolha da métrica e da restrição imposta na constante γ é que o termo $\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}}$ é matematicamente idêntico ao fator de Lorentz da relatividade. Como $f(\phi)$ agora é uma função periódica com período 2π , devemos esperar que as funções de onda $\Phi_\lambda(\phi)$ também sejam periódicas. Dito isso, a condição de contorno que iremos considerar para determinar o valor de λ será $\Phi(-\pi) = \Phi(\pi)$. Aplicando

a condição de contorno, temos

$$\begin{aligned}
 & \exp\left(i\frac{2\lambda}{\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan\left[\frac{\gamma + \tan(-\frac{\pi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right]\right) = \exp\left(i\frac{2\lambda}{\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan\left[\frac{\gamma + \tan(\frac{\pi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right]\right) \Rightarrow \\
 & \Rightarrow \exp\left(\frac{-i\lambda\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right) = \exp\left(\frac{i\lambda\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right) \Rightarrow \exp\left(\frac{i\lambda 2\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right) = 1 \Rightarrow \\
 & \Rightarrow \frac{\lambda 2\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}} = m 2\pi, \text{ com } m \in \mathbb{Z}.
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

De (4.33) tiramos que λ deve ser

$$\lambda = \lambda_m = m\sqrt{1-\gamma^2}. \tag{4.34}$$

Portanto, $\Phi_\lambda(\phi) = \Phi_m(\phi)$ é dada por

$$\Phi_m(\phi) = C_2 \exp\left(i2m \arctan\left[\frac{\gamma + \tan(\frac{\phi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right]\right). \tag{4.35}$$

Agora, determinaremos o valor da constante C_2 através da normalização da função de onda $\Phi_m(\phi)$. Normalizando, temos

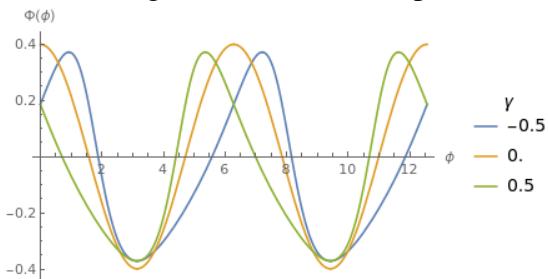
$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{|\Phi_m(\phi)|^2}{1+\gamma \sin \phi} d\phi = |C_2|^2 \frac{2\pi}{\sqrt{1-\gamma^2}} = 1 \Rightarrow C_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{2\pi}}. \tag{4.36}$$

Com a constante C_2 determinada, a função de onda pode ser reescrita como

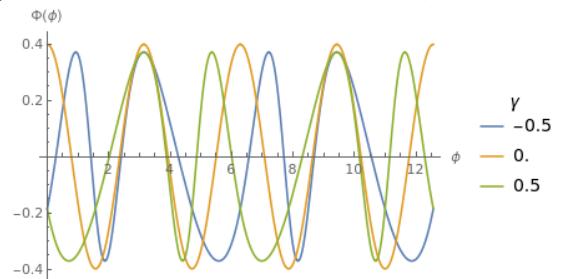
$$\Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{2\pi}} \exp\left(i2m \arctan\left[\frac{\gamma + \tan(\frac{\phi}{2})}{\sqrt{1-\gamma^2}}\right]\right). \tag{4.37}$$

Nas figuras 11, 12 e 13, plotamos os gráficos das partes real e imaginária da função de onda para $m = -2, -1, 1, 2$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.

Figura 11 – Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1, -2, 2$.



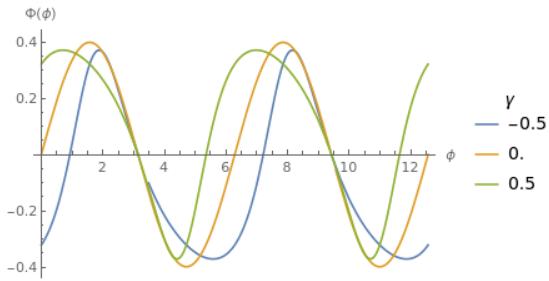
(a) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -1, 1$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.



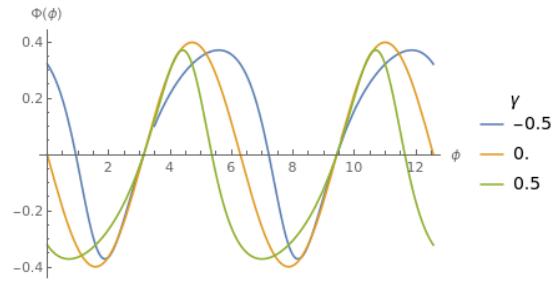
(b) Gráfico da parte real das funções de onda com $m = -2, 2$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 12 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -1, 1$.



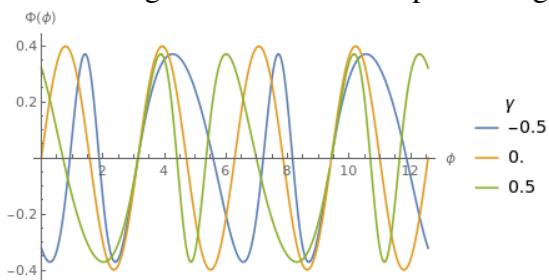
(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 1$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.



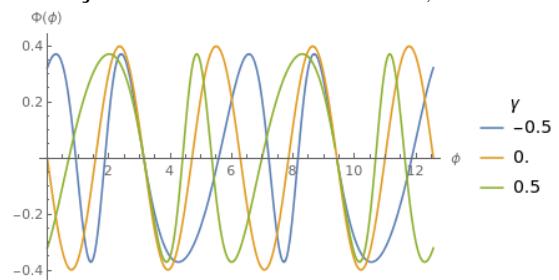
(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -1$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 13 – Gráfico da parte imaginária das funções de onda com $m = -2, 2$.



(a) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = 2$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.



(b) Gráfico da parte imaginária da função de onda com $m = -2$ e $\gamma = -0.5, 0, 0.5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Notemos que, devido a paridade da parte real das funções de onda, os gráficos para m 's positivos e negativos são os mesmos de modo que o mesmo gráfico foi utilizado para ambos os valores como evidenciado na Figura 11. O mesmo não ocorre para a parte imaginária, também devido a paridade. Assim, nas Figuras 12 e 13, foram colocados lado a lado os gráficos para os m 's positivos e negativos para evidenciar que a diferença entre os gráficos é somente a fase da onda. Vale ressaltar que para $\gamma = 0$, os gráficos são idênticos aos obtidos na seção 4.1.

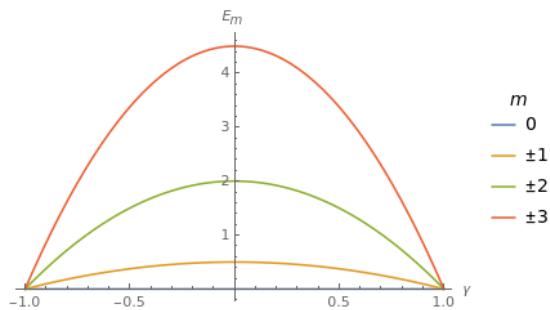
Agora, lembrando que $\lambda^2 = \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2}$ e pela equação (4.34), podemos determinar as autoenergias para este caso. São elas

$$\lambda_m^2 = \frac{2\mu R^2 E_m}{\hbar^2} = m^2(1 - \gamma^2) \implies E_m = \frac{m^2 \hbar^2 (1 - \gamma^2)}{2\mu R^2}. \quad (4.38)$$

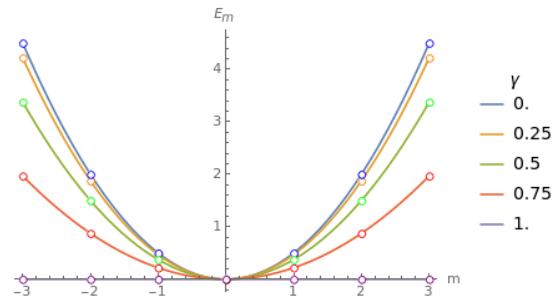
Na figura 14, plotamos os gráficos das energias para $m = -2, -1, 0, 1, 2$ e $\gamma = 0, 0.5, 1$.

Comparando os resultados obtidos nesta seção com os resultados obtidos na seção 4.1, podemos ver que: as autofunções são todas complexas, exceto para $m = 0$, os níveis de energia são quantizados e dependentes de γ , a energia do estado fundamental é zero e, para $m \neq 0$, as energias são duplamente degeneradas. Todos estes resultados são equivalentes aos resultados obtidos na seção 4.1. É importante ressaltar que no limite de $\gamma = 0$, todos os resultados

Figura 14 – Gráficos das energias para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Para a elaboração dos gráficos foram considerados $\hbar = \mu = R = 1$.



(a) Espectro de energia para valores discretos de m . Neste caso foi considerado $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.



(b) Gráfico de energia como função de m . Os círculos indicam os valores permitidos de m , que só podem assumir valores inteiros. A linha é apenas um guia para os olhos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

retornam exatamente para os resultados do Rotor Quântico Fixo usual, como pode ser visto pelos gráficos apresentados.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho buscamos fazer uma descrição completa do formalismo geral de momento angular na mecânica quântica, tendo como base as definições clássicas de momento angular e teoria de grupos. Além disso, apresentamos o formalismo do *PDTO* em três dimensões e como a equação de movimento se modifica com o efeito de uma função $f(r, \phi)$ não singular na métrica das coordenadas polares.

Ademais, propomos uma breve generalização do operador de momento angular orbital no formalismo do *PDTO* utilizando as ideias discutidas nas seções iniciais do capítulo 3. A partir das construções feitas nos capítulos 2 e 3 resolvemos o caso usual do rotor quântico fixo bidimensional, obtendo as funções de onda e as respectivas autoenergias relacionadas. Em seguida, resolvemos o problema do rotor quântico fixo no formalismo do *PDTO*, considerando a métrica apresentada na equação 3.31 com duas escolhas de $f(r, \phi)$. Obtivemos as funções de onda e as autoenergias associadas para cada uma das escolhas de $f(r, \phi)$, bem como plotamos os gráficos para algumas das funções de onda e algumas das energias.

Para a primeira escolha de $f(r, \phi)$, foi possível notar a quebra de periodicidade na função de onda. Tal efeito era esperado devido a forma não periódica da função utilizada. Apesar da quebra da periodicidade, ao comparar os resultados obtidos com os resultados do rotor quântico bidimensional usual, foi possível observar uma semelhança entre os mesmos. Tal semelhança é confirmada ao fazermos o limite de γ indo para zero, que é equivalente a tomar o limite de $f(r, \phi)$ indo para um. Para a segunda escolha de $f(r, \phi)$, a periodicidade é mantida na função de onda. Isso era esperado devido a periodicidade da função $f(r, \phi)$ escolhida. Assim como no primeiro caso, foi possível observar uma semelhança nos resultados obtidos em comparação com os resultados do rotor quântico bidimensional usual. Essa semelhança é mais evidente no limite de γ indo para zero. Em resumo, ao tomar este limite do parâmetro γ em ambas as escolhas de $f(r, \phi)$, todos os resultados retornam para os resultados do rotor quântico bidimensional usual.

Por fim, temos como perspectivas futuras estender o formalismo proposto para o momento de spin, de modo que seja possível considerar a solução de problemas de partículas com spin. Ademais queremos fazer a aplicação desse formalismo para resolver o rotor quântico bidimensional com r variável, bem como o rotor quântico fixo tridimensional. Buscaremos obter as funções de onda e as energias acessíveis que descrevem a dinâmica destes problemas e, assim como feito neste trabalho, plotar os respectivos gráficos para auxiliar na análise do problema.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, V.; CUNHA, S.; COSTA, D. da; COSTA FILHO, R. N. Dirac fermions in graphene using the position-dependent translation operator formalism. **Physical Review B**, [S. l.], v. 102, n. 23, p. 235404, 2020.
- ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; HARRIS, F. E. **Mathematical methods for physicists**: a comprehensive guide. 7th. Amsterdam: Academic press, 2011.
- BARBAGIOVANNI, E.; COSENTINO, S.; LOCKWOOD, D.; COSTA FILHO, R.; TERRASI, A.; MIRABELLA, S. Influence of interface potential on the effective mass in ge nanostructures. **Journal of Applied Physics**, [S. l.], v. 117, n. 15, p. 154304, 2015.
- BARBAGIOVANNI, E.; COSTA FILHO, R. Quantum confinement in nonadditive space with a spatially dependent effective mass for si and ge quantum wells. **Physica E**, [S. l.], v. 63, p. 14–20, 2014.
- BARCELOS NETO, J. **Matemática para Físicos com Aplicações**. v. 1. São Paulo: Livraria da Física, 2010.
- BARCELOS NETO, J. **Teoria de Campos ea Natureza**: parte quântica. São Paulo: Livraria da Física, 2017.
- BENDER, C. M. Introduction to pt-symmetric quantum theory. **Contemporary physics**, [S. l.], v. 46, n. 4, p. 277–292, 2005.
- BENDER, C. M. Making sense of non-hermitian hamiltonians. **Reports on Progress in Physics**, [S. l.], v. 70, n. 6, p. 947, 2007.
- BENDER, C. M. Pt-symmetric quantum theory. **Journal of Physics**, [S. l.], v. 631, n. 1, p. 1–12, 2015.
- BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having pt-symmetry. **Physical review letters**, [S. l.], v. 80, n. 24, p. 5243, 1998.
- BRAGA, J. P. M. **Mecânica quântica não-aditiva**. 2015. 62f. Tese (Doutorado em física) – Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2015.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics**: basic concepts, tools, and applications. 2nd. v. 1. Weinheim: Wiley-VCH, 2019.
- COSTA FILHO, R. N.; ALENCAR, G.; SKAGERSTAM, B.-S.; ANDRADE JÚNIOR, J. S. Morse potential derived from first principles. **Europhysics Letters**, [S. l.], v. 101, n. 1, p. 10009, 2013.
- COSTA FILHO, R. N.; OLIVEIRA, S.; AGUIAR, V.; COSTA, D. da. Two-dimensional electron gas in a non-euclidean space. **Physica E**, [S. l.], v. 129, p. 114639, 2021.
- COSTA FILHO, R. N. da; ALMEIDA, M.; FARÍAS, G. A.; ANDRADE JÚNIOR, J. S. Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. **Physical Review A**, [S. l.], v. 84, n. 5, p. 050102, 2011.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **The Feynman lectures on physics**. v. 3. London: Pearson, 2009.

GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to Quantum Mechanics**. 3. ed. United Kingdom: Cambridge University Press, 2018.

LAPLACE-BELTRAMI equation. *In:* ENCYCLOPEDIA of mathematics. 2020. Disponível em: http://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Laplace-Beltrami_equation&oldid=47576. Acesso em: 13 jul. 2024.

ZHOU, Z.-Y.; LI, Y.; DING, D.-S.; ZHANG, W.; SHI, S.; SHI, B.-S.; GUO, G.-C. Orbital angular momentum photonic quantum interface. **Light: Science & Applications**, [S. l.], v. 5, n. 1, p. e16019–e16019, 2016.

ZWIEBACH, B. **Mastering Quantum Mechanics**: essentials, theory, and applications. Cambridge, MA: The MIT Press, 2022.