AULA 10

Mecânica Quântica I

AULA 10

Adição do Momento Angular

Em muitos problemas físicos o momento angular do sistema é a soma do momento angular de vários sub-sistemas.

Sejam $\vec{J}_1$ e $\vec{J}_2$ dois momentos angulares tais que $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$, sendo j_1 e j_2 suas magnitudes respectivas

O espaço dos estados, $\mathcal{H}_{j_1 j_2}$, é gerado pelo produto dos auto-estados de momento angular separados

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (1)$$

de $\dim \equiv (2j_1+1)(2j_2+1)$

Na base definida por (1) os observáveis compatíveis são

$J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}$

O operador momento angular total do sistema

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (2)$$

queremos construir os auto-estados $|jm\rangle$ de J^2 e J_z

Existem 2 outros operadores compatíveis com J^2 e J_z:

J_1^2 e J_2^2, logo a base do momento angular total é

$|j m j_1 j_2\rangle$

AULA 10

Mecânica Quântica I

Note que:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = \frac{1}{2}\left(J^2 - J_1^2 - J_2^2\right) = \frac{1}{2}\left[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)\right] \quad (3)$$

também é compatível, mas é função dos demais operadores.

Podemos então escrever (lembre-se que $\vec{J}$ é mom. angular)

$$J^2 |j m j_1 j_2\rangle = j(j+1)\, |j m j_1 j_2\rangle \quad (4a)$$

$$J_z |j m j_1 j_2\rangle = m\, |j m j_1 j_2\rangle \quad (4b)$$

j inteiro ou semi-inteiro

$$m = -j, \cdots, j$$

como $\quad J_z = J_{1z} + J_{2z} \qquad m = m_1 + m_2 \quad (5)$

— Precisamos encontrar o espectro dos valores permitidos de j, dados j_1 e j_2

— Precisamos encontrar a transformação entre as duas bases

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad \text{e} \quad |j m j_1 j_2\rangle$$

(base desacoplada) (base acoplada)

Vamos começar com a primeira tarefa. Antes de considerar a situação geral, vamos examinar um caso simples: a soma de dois spins ½

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 = \frac{\vec{\sigma}_1}{2} + \frac{\vec{\sigma}_2}{2} \quad ; \quad \mathcal{H}_{1/2\,1/2}$$

$$S_1^2 \left|\tfrac{1}{2}\, +\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 = S_1^2 |+\rangle_1 = s_1(s_1+1)|+\rangle_1 = \frac{3}{4}|+\rangle_1$$

$$S_1^2 \left|\tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 = S_1^2 |-\rangle_1 = s_1(s_1+1)|-\rangle_1 = \frac{3}{4}|-\rangle_1$$

$$S_{1z}|\pm\rangle_1 = m_{s_1}|\pm\rangle_1 = \pm 1/2\, |\pm\rangle_1 \qquad m_{s_1} = \pm 1/2$$

de forma análoga

$$S_2^2|\pm\rangle_2 = s_2(s_2+1)\,|\pm\rangle_2 \qquad s_2 = 1/2$$

$$S_{2z}|\pm\rangle_2 = m_{s_2}|\pm\rangle_2 \qquad m_{s_2} = \pm 1/2$$

$$m_s = m_{s_1} + m_{s_2} = 0,\, 1,\, -1,\, 0$$

$$|s\, m_s\rangle \ :\ (m_s)_{max} = 1 \Rightarrow s = 1$$

$$S_\pm |1\, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}\ |1\ m_s \pm 1\rangle$$

como já vimos na teoria de momento angular

$$|1 1 | \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2}\rangle = |11\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2$$

$$S_\pm = S_{1\pm} + S_{2\pm}$$

$$S_- |11\rangle = \sqrt{2}\, |10\rangle = S_{1-}|+\rangle_1 |+\rangle_2 + |+\rangle_1 S_{2-}|+\rangle_2$$

$$= |-\rangle_1 |+\rangle_2 + |+\rangle_1 |-\rangle_2$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle_1 |-\rangle_2 + |-\rangle_1 |+\rangle_2\right]$$

$$S_-|10\rangle = \sqrt{2}|1\,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[S_{1-}|+\rangle_1|-\rangle_2 + S_{2-}|+\rangle_1\cancel{|-\rangle_2}^{\,0}\right.$$

$$\left. + S_{1-}\cancel{|-\rangle_1}^{\,0}|+\rangle_2 + |-\rangle_1 S_{2-}|+\rangle_2\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|-\rangle_1|-\rangle_2 + |-\rangle_1|-\rangle_2\right]$$

$$|1\,-1\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2$$

$\boxed{\text{tripleto } S=1}$ (simétrico)

$$|11\rangle = |+\rangle_1\,|+\rangle_2 \qquad (6a)$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle_1|-\rangle_2 + |-\rangle_1|+\rangle_2\right] \qquad (6b)$$

$$|1\,-1\rangle = |-\rangle_1\,|-\rangle_2 \qquad (6c)$$

$\boxed{\text{singleto } S=0}$ (antisimétrico)

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2\right] \qquad (6d)$$

ortogonal ao tripleto

$\boxed{\text{Sob rotação}}$ $\quad D(R) = e^{-i\theta\,\vec{n}\cdot\vec{S}}$ (operador de rotação)

como uma rotação não pode mudar o valor de S, uma rotação aplicada a um membro particular $|S\, m_s\rangle$ produzirá uma combinação linear de estados com mesmo S. $\Rightarrow$ não há mistura entre o tripleto e o singleto. O espaço de 4 dimensões $\mathcal{H}_{1/2\;1/2}$ se decompõe sub-espaços de 3 dimensões $\mathcal{H}_1$ e 1 dimensão $\mathcal{H}_0$. Essa decomposição é invariante por rotação! (4)

Por essa razão os operadores de projeção nos sub-espaços invariantes são de interesse especial

$$\vec{S}^2 = S(S+1) = \vec{S}_1^{\,2} + \vec{S}_2^{\,2} + 2\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$
$$= S_1(S_1+1) + S_2(S_2+1) + 2\,\frac{\vec{\sigma}_1}{2} \cdot \frac{\vec{\sigma}_2}{2}$$

$$S(S+1) = \frac{1}{2}\left(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2\right)$$

logo:

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 1 \qquad (S=1) \qquad (7a)$$
$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3 \qquad (S=0) \qquad (7b)$$

Os operadores de projeção nos sub-espaços definidos por S são

$$P_S = \frac{1}{4}\left(1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2\right) \quad (\text{singleto}) \quad (8a)$$
$$P_t = \frac{1}{4}\left(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2\right) \quad (\text{tripleto}) \quad (8b)$$

$$P_t + P_S = \mathbb{1} \quad (8c)$$

Antes de tratarmos o caso geral vale discutir um outro caso particular $j_1 = 1$ $j_2 = 1$ a soma de dois momentos angulares iguais a 1. Veremos logo mais que

$$j = \underset{1}{0},\ \underset{3}{1},\ \underset{5}{2} \Rightarrow \text{espaço de dimensão } 9$$

Vimos na aula passada que os estados com $j = 1$ ($|1m\rangle$) se transformam como um vetor. De fato se A_i e B_i são as componentes Cartesianas de 2 vetores quaisquer, o espaço de dim 9 gerado pelo produto $A_i B_j$ é o espaço de interesse: Podemos formar

$$I = A_i B_i \longrightarrow \text{um escalar}$$

$$V_i = \varepsilon_{ijk} A_i B_j \longrightarrow \text{um vetor}$$

$$X_{ij} = A_i B_j + A_j B_i - \frac{2}{3} I \delta_{ij} \longrightarrow \text{um tensor simétrico}$$

de traço nulo

Essas formas bilineares geram 3 sub-espaços $\mathcal{H}_j$.

$\boxed{\text{Momentos Angulares Arbitrários}}$ $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Vamos construir o espaço produto tensorial de dimensão $(2j_1+1)(2j_2+1)$

$$\mathcal{H}_{j_1 j_2} = \mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} \quad (9)$$

uma base possível é

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \qquad \{\vec{J}_1^{\,2}, J_{1z}, \vec{J}_2^{\,2}, J_{2z}\}$$

a outra como já discutimos é

$$|j m j_1 j_2\rangle \rightarrow \{\vec{J}^{\,2}, J_z, \vec{J}_1^{\,2}, \vec{J}_2^{\,2}\}$$

observemos:

1) todo vetor ~~[illegible]~~ $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ é auto-vetor de J_z com auto-valor $m = m_1 + m_2$

2) se um valor de j é possível, devemos obter aplicando J_+ e J_- uma série de $(2j+1)$ vetores $|jm\rangle$ (6)

$-j_1 \leq m_1 \leq j_1 \qquad -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \qquad\qquad -j_1-j_2 \leq m \leq j_1+j_2$

maximo valor de $m = (m_1)_{max} + (m_2)_{max} = j_1 + j_2 \Rightarrow$ só há um estado $|j = j_{max} = j_1+j_2 \;\; m_{max} = j_1+j_2\rangle$

$m = m_{max} - 1 = (j_1-1) + j_2$ ou $j_1 + (j_2-1)$ um desses estados será membro do multipleto $|j = j_{max} \; m\rangle$ o outro começa um novo multipleto $|j = j_{max}-1 \; m\rangle$

$m = m_{max} - 2 = (j_1-2) + j_2$ ou $(j_1-1) + (j_2-1)$ ou $(j_1) + (j_2-2)$ um desses estados será membro do multipleto $|j = j_{max} \; m\rangle$ um outro membro de $|j = j_{max}-1 \; m\rangle$ e o terceiro de $|j = j_{max}-2 \; m\rangle$

$\vdots$

$m = m_{min} - 1 = (-j_1+1) - j_2$ ou $-j_1 (-j_2+1)$

$m = m_{min} = -j_1 - j_2 = -m_{max}$

Vemos que a degenerescência de m cresce até atingir um máximo e depois decresce novamente. Toda vez que a degenerescência de m cresce abrimos um novo multipleto, mas isso para quando a degenerescência para de crescer em $m = |j_1 - j_2|$ o que estabelece que o valor mínimo de j é $|j_1 - j_2|$

$$\therefore \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \qquad (10)$$

Costumamos designar os multipletos de momento angular pela sua multiplicidade

ex: • $j = 1$ é um tripleto : 3

• $j = 1/2$ é um dubleto : 2

- $j_1 = 1 + j_1 = 1$: $3 \otimes 3 = 1 \oplus 3 \oplus 5$

  $j = 0, 1, 2$

- $j_1 = 1/2 + j_2 = 1/2$ $\quad 2 \otimes 2 = 1 \oplus 3$

  $j = 0, 1$

Em geral:

$$(2j_1+1) \otimes (2j_1+1) = (2|j_1+j_2|+1) \oplus \ldots \oplus (2|j_1-j_2|+1)$$

que é um espaço produto tensorial de dim $(2j_1+1)(2j_2+1)$ e gerado pelo produto dos estados $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ e pode ser decomposto em sub-espaços invariantes por rotação $\mathcal{H}_j$:

$$\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{H}_j \oplus \qquad (11)$$

dizemos que o espaço do lado esquerdo é redutível a espaços $\mathcal{H}_j$ irredutíveis do lado direito. Isso significa que em cada sub-espaço $\mathcal{H}_j$ qualquer ket sob rotação será uma combinação linear de todos os kets do mesmo sub-espaço $\mathcal{H}_j$.

Como construímos $|jm\, j_1 j_2\rangle$?

Coeficiente de Clebsch-Gordan

$$|jm\, j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 m_1\, j_2 m_2\rangle \underbrace{\langle j_1 m_1\, j_2 m_2 | jm\, j_1 j_2\rangle}_{\equiv\, \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle} \qquad (12)$$

Relação Inversa

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{jm} |jm\rangle\langle jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \qquad (13)$$

$$\sum_{jm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle \langle jm | j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\, \delta_{m_2 m_2'} \qquad (14)$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle jm | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m'\rangle = \delta_{jj'}\, \delta_{mm'} \qquad (15)$$

muitas vezes escrevemos $|j_1 m_1 j_2 m_2)$ como $|m_1 m_2)$ simplesmente uma vez que j_1 e j_2 estão fixos da mesma forma que abreviamos $|jm j_1 j_2)$ por $|jm)$

Aplicando $J_\mp$ em (12) obtemos

$$J_\mp |jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} \left[J_{1\mp} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | jm\rangle + J_{2\mp} |m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2 | jm\rangle \right]$$

$$a_\mp(jm)\,|j\, m\mp 1\rangle = \sum_{m_1 m_2} \Big[a_\mp(j_1 m_1)\, |m_1 \mp 1\; m_2)\, \langle m_1 m_2 | jm\rangle +$$

$$a_\mp(j_2 m_2)\, |m_1\; m_2 \mp 1\rangle\langle m_1 m_2 | jm\rangle \Big]$$

$$a_\mp(jm) \sum_{m_1 m_2} |m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2 | j\; m\mp 1\rangle = \sum_{m_1 m_2} \Big[a_\mp(j_1 m_1)\, |m_1 \mp 1\; m_2)$$

$$+\, a_\mp(j_2 m_2)\, |m_1\; m_2 \mp 1\rangle \Big] \langle m_1 m_2 | jm\rangle \qquad (16)$$ com

$$a_\pm(jm) = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}$$

(16) × $\langle m_1' m_2'|$ leva a

$$a_{\mp}(jm)\, \langle m_1 m_2 | j\; m\mp 1\rangle = a_{\pm}(j_1 m_1)\, \langle m_1 \pm 1\; m_2 | jm\rangle$$

$$+\, a_{\mp}(j_2 m_2)\, \langle m_1\; m_2 \pm 1 | jm\rangle \quad (17)$$

A Eq. (17) combinada com a condição de normalização permite determinar todos os coeficientes de Clebsch-Gordan a menos de uma fase arbitrária. Na prática usamos tabelas, exceto no caso de dim. mais baixas.

Elementos de Matriz de Operadores Vetoriais

Considere o operador vetorial arbitrário $\vec{V}$ na chamada base esférica V_μ, $\mu = 0, \pm 1$

$$V_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 + iV_2) \qquad V_0 = V_3 \qquad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 - iV_2) \quad (18)$$

queremos encontrar $\langle j'm' | V_\mu | jm\rangle$

Vimos que $\langle jm | V_i | jm'\rangle = \lambda_V \langle jm | J_i | jm'\rangle$ mas o operador J_i não conecta estados de j diferentes, enquanto que um operador vetorial qualquer, em geral, conecta. A base acima permite determinar os elementos fora da diagonal. i.e. $\langle j'm' | V_\mu | jm\rangle$

Para isso vamos aplicar uma rotação a $V_\mu |jm\rangle$

V_μ transforma-se com harmônicos esféricos, i.e. estados $|1\mu\rangle$ e logo $|1\mu\rangle \otimes |jm\rangle$ transforma-se como $3 \otimes (2j+1)$

e logo os valores possíveis $j' = j-1, j, j+1$

Vemos também que $V_\mu |jm\rangle$ é autoestado de J_z com auto-valores $\mu+m$

$\therefore \langle j'm'|V_\mu|jm\rangle = 0$ exceto se j e j' diferem por 0 ou 1 e $m' = m+\mu$ (Regras de Seleção p/ operadores Vetoriais)

Esses operadores governam grande parte dos fenômenos de radiação (emissão, absorção, espalhamento de radiação e.m.) pois momentos de dipolo elétrico de átomos e moléculas são recorrentes nesses fenômenos.

Podemos mostrar também que

$[V_i, J_k] = i\,\varepsilon_{ikl}\, V_l$ pois é um operador vetorial

$[J_z, V_\mu] = \mu\, V_\mu$

$[J_\pm, V_\mu] = a_\pm(1\mu)\, V_{\mu\pm1}$ (lista)