Aula 9

Função de onda de duas partículas

Adição de spins

$$4 = 3 + 1$$

Função de onda de duas partículas

Partículas não interagentes: $\chi = \chi^{(1)}\,\chi^{(2)}$

Vamos verificar se é uma boa hip'tese:

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}\,|\chi\rangle = E\,|\chi\rangle \qquad \left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_1\,\chi^{(1)} = E_1\,\chi^{(1)} \\ \\ \hat{H}_2\,\chi^{(2)} = E_2\,\chi^{(2)} \end{array} \right.$$

ou $\hat{H}\chi = E\,\chi$

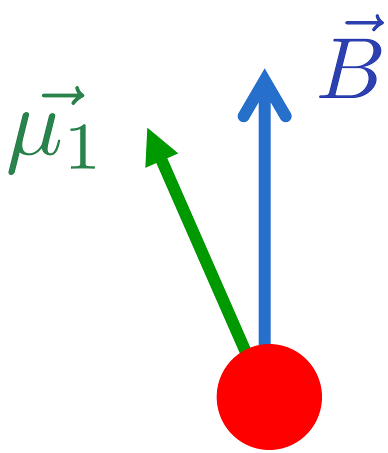
As partículas 1 e 2 interagem com um agente externo mas não entre si !

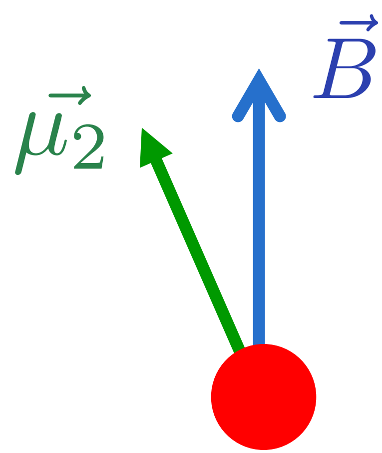
Notação :

$$\psi(1,2) = \psi_s(1,2) = |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle\,|\uparrow\rangle = \chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)}$$

Estão em espaços diferentes !!!

(espaço 1 da partícula 1 ; espaço 2 da partícula 2)





$$H_1 = -\vec{\mu}_1.\vec{B} \qquad H_2 = -\vec{\mu}_2.\vec{B}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \qquad\qquad \chi = \chi^{(1)}\,\chi^{(2)}$$

$$\hat{H}\,\chi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)}$$

$$\hat{H}\,\chi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)} = \hat{H}_1\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)} + \hat{H}_2\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)}$$

estão em espaços diferentes !!!

$$= \hat{H}_1\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)} + \chi^{(1)}\,\hat{H}_2\,\chi^{(2)}$$

$$= E_1\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)} + \chi^{(1)}\,E_2\,\chi^{(2)}$$

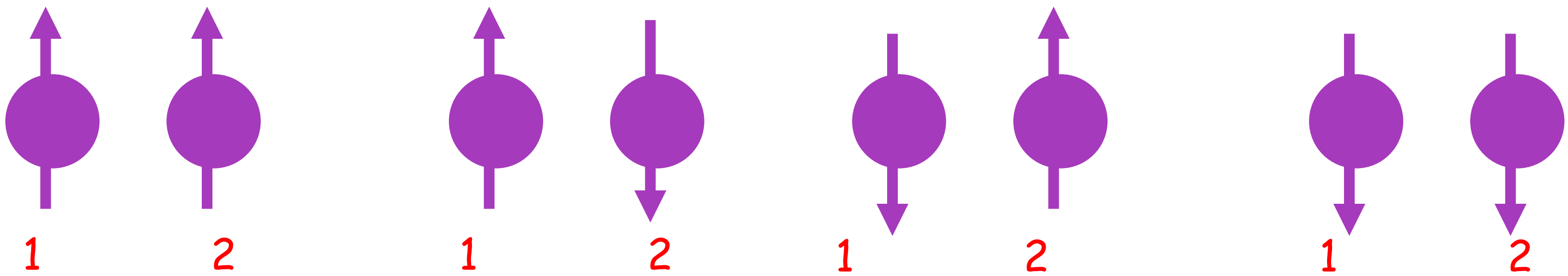
$$= (E_1 + E_2)\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)} = E\,\chi^{(1)}\,\chi^{(2)}$$

$$\boxed{\hat{H}\chi = E\,\chi}$$

$$\begin{cases} \hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \\ \\ \chi = \chi^{(1)}\,\chi^{(2)} \end{cases} \longrightarrow \boxed{\hat{H}\chi = E\,\chi}$$

Produto é solução da ESIT !

Projeção do spin total na direção z



$$4 = 3 + 1$$

$$
\begin{aligned}
S_z\,\chi_1\,\chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)})\chi_1\,\chi_2 \\
&= S_z^{(1)}\,\chi_1\,\chi_2 + S_z^{(2)}\chi_1\,\chi_2 \\
&= m_1\,\hbar\,\chi_1\,\chi_2 + m_2\,\hbar\,\chi_1\,\chi_2 \\
&= (m_1 + m_2)\,\hbar\,\chi_1\,\chi_2
\end{aligned}
$$

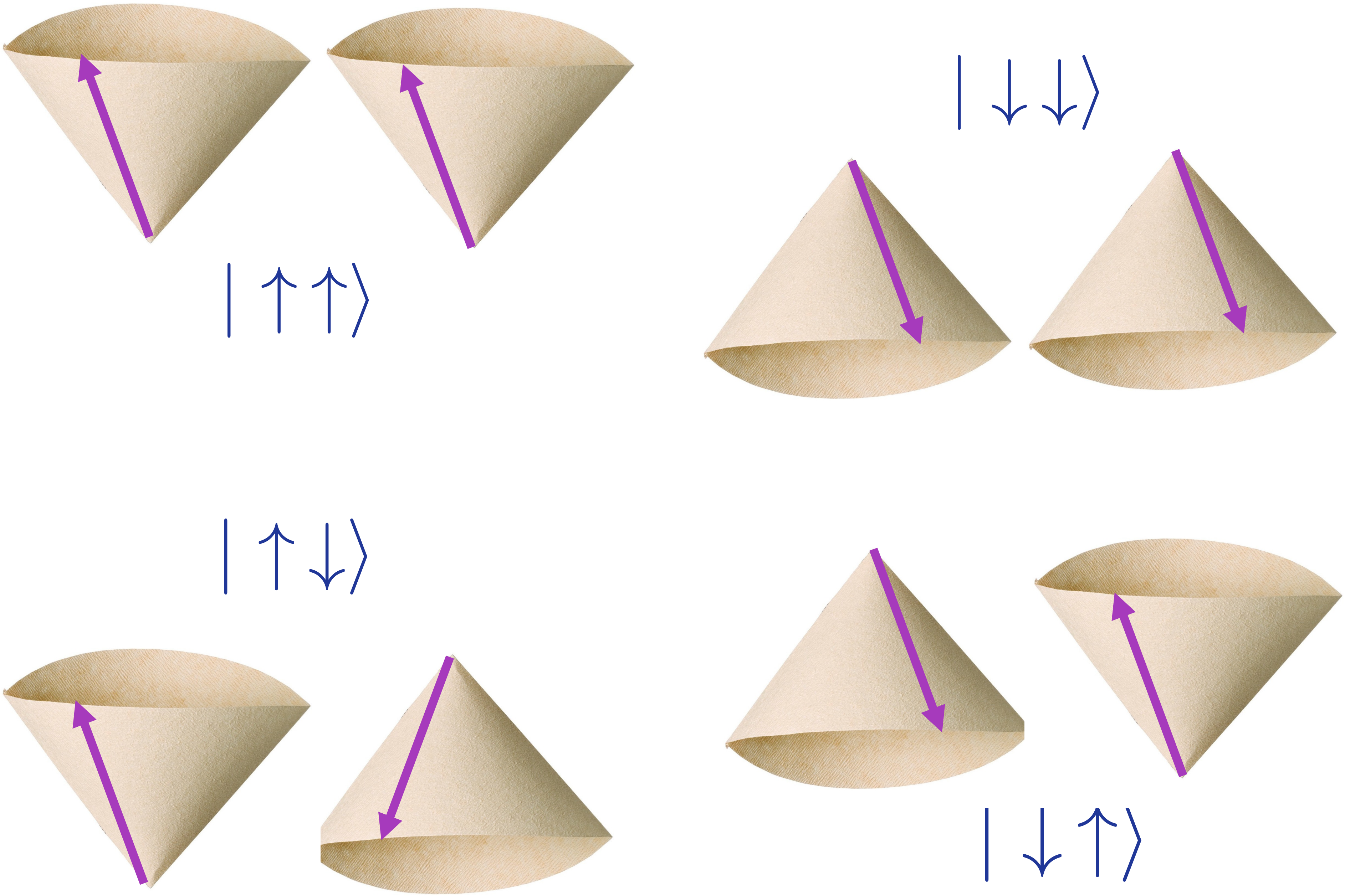
$$\boxed{S_z\,\chi_1\,\chi_2 = m\,\hbar\,\chi_1\,\chi_2}$$

$$m = (m_1 + m_2)$$

m = 1 m = -1 m = 0 m = 0

Vamos “ver” os spins das duas partículas

Faça você mesmo em casa !


$|\uparrow\uparrow\rangle$
$|\downarrow\downarrow\rangle$
$|\uparrow\downarrow\rangle$
$|\downarrow\uparrow\rangle$

Vamos "abaixar" o spin do estado

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)}$$

Lembramos que :

$$\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \boxed{\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle}$$

$$\hat{S}_+ |\uparrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \boxed{\hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0}$$

$$\hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \boxed{\hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle}$$

$$\hat{S}_- |\downarrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \boxed{\hat{S}_- |\downarrow\rangle = 0}$$

$$S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$$

$$S_- \, \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)} = (S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)}$$

$$= S_-^{(1)} \, \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)} + S_-^{(2)} \, \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)}$$

$$= \hbar \, \chi_-^{(1)} \, \chi_+^{(2)} + \hbar \, \chi_+^{(1)} \, \chi_-^{(2)}$$

$$\boxed{S_- \, |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar \, (\, |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \,)}$$

Vamos "abaixar" o spin do estado

$$|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle$$

$$S_- \left[\hbar\, \chi_-^{(1)}\, \chi_+^{(2)} + \hbar\, \chi_+^{(1)}\, \chi_-^{(2)}\right] =$$

$$= S_-^{(1)} \left[\hbar\, \underset{\searrow\, 0}{\chi_-^{(1)}}\, \chi_+^{(2)} + \hbar\, \chi_+^{(1)}\, \chi_-^{(2)}\right] +$$

$$+ S_-^{(2)} \left[\hbar\, \chi_-^{(1)}\, \chi_+^{(2)} + \hbar\, \underset{\searrow\, 0}{\chi_+^{(1)}}\, \chi_-^{(2)}\right]$$

$$S_- \left[\hbar\, \chi_-^{(1)}\, \chi_+^{(2)} + \hbar\, \chi_+^{(1)}\, \chi_-^{(2)}\right] =$$

$$= \hbar^2\, \chi_-^{(1)}\, \chi_-^{(2)} + \hbar^2\, \chi_-^{(1)}\, \chi_-^{(2)} = 2\, \hbar^2\, \chi_-^{(1)}\, \chi_-^{(2)}$$

$$\boxed{S_-\, \hbar\, \left(\,|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\,\right) = 2\, \hbar^2\, |\downarrow\downarrow\rangle}$$

Três estados $|s, m_s\rangle$ conectados por S_- :

$$|1,1\rangle \rightarrow |1,0\rangle \rightarrow |1,-1\rangle$$

Este é o tripleto de spin 1

Vamos mostrar que o tripleto tem spin 1

$$S^2 = \vec{S} \, . \, \vec{S} = \left(\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} \right) . \left(\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} \right)$$

$$S^2 = \left(S^{(1)} \right)^2 + \left(S^{(2)} \right)^2 + 2 \, \vec{S}^{(1)} \, . \, \vec{S}^{(2)}$$

$$= \left(S^{(1)} \right)^2 + \left(S^{(2)} \right)^2 + 2 \left(S_x^{(1)} \, . \, S_x^{(2)} + S_y^{(1)} \, . \, S_y^{(2)} + S_z^{(1)} \, . \, S_z^{(2)} \right)$$

$$S^2 \, |1 \, 1\rangle = S^2 \, \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)}$$

$$= \left(S^{(1)} \right)^2 \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)} + \left(S^{(2)} \right)^2 \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)} +$$

$$+ 2 \left(S_x^{(1)} \, . \, S_x^{(2)} + S_y^{(1)} \, . \, S_y^{(2)} + S_z^{(1)} \, . \, S_z^{(2)} \right) \chi_+^{(1)} \, \chi_+^{(2)}$$

Vamos usar :

$$S_z\,\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\,\chi_+ \qquad S_x\,\chi_- = \frac{\hbar}{2}\,\chi_+ \qquad S_y\,\chi_+ = -\frac{\hbar}{2i}\,\chi_-$$

$$S_z\,\chi_- = -\frac{\hbar}{2}\,\chi_- \qquad S_x\,\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\,\chi_- \qquad S_y\,\chi_- = \frac{\hbar}{2i}\,\chi_+$$

$$S^2\,\chi_+ = \frac{3}{4}\,\hbar^2\,\chi_+ \qquad S^2\,\chi_- = \frac{3}{4}\,\hbar^2\,\chi_-$$

Exercício

$$= \left(S^{(1)}\right)^2 \chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)} + \left(S^{(2)}\right)^2 \chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)} +$$

$$+\,2\left(S_x^{(1)}\,.\,S_x^{(2)} + S_y^{(1)}\,.\,S_y^{(2)} + S_z^{(1)}\,.\,S_z^{(2)}\right)\chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)}$$

$$
= \left(S^{(1)}\right)^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} + \left(S^{(2)}\right)^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} +
$$

$$
+ 2 \left(S_x^{(1)} \cdot S_x^{(2)} + S_y^{(1)} \cdot S_y^{(2)} + S_z^{(1)} \cdot S_z^{(2)} \right) \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)}
$$

$$
= \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} + \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} +
$$

$$
\cancel{+ 2 \frac{\hbar}{2} \chi_-^{(1)} \frac{\hbar}{2} \chi_-^{(2)}} \cancel{+ 2 (-1) \frac{\hbar}{2i} \chi_-^{(1)} (-1) \frac{\hbar}{2i} \chi_-^{(2)}} + 2 \frac{\hbar}{2} \chi_+^{(1)} \frac{\hbar}{2} \chi_+^{(2)}
$$

$$
= \frac{3}{2} \hbar^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} + \frac{\hbar^2}{2} \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} = 2\hbar^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)}
$$

$$
\boxed{S^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} = 2\hbar^2 \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)}}
$$

$$\boxed{S^2\,\chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)} \;=\; 2\hbar^2\,\chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)}}$$

Lembrando que
$$\begin{cases} \hat{S}^2\,\psi \;=\; s\,(s\,+\,1)\,\hbar^2\,\psi \\[2em] \hat{S}_z\,\psi \;=\; m_s\,\hbar\,\psi \end{cases}$$

$$S^2\,\chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)} \;=\; s\,(s+1)\,\hbar^2\,\chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)}$$

$$s\,(s+1) \;=2$$

$$\boxed{s \;=\; 1}$$

Exercício: verifique que os estados abaixo tem spin 1

$$|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle = \chi_-^{(1)}\,\chi_+^{(2)} + \chi_+^{(1)}\,\chi_-^{(2)}$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = \chi_-^{(1)}\,\chi_-^{(2)}$$

Exercício: verifique que o estado abaixo tem spin 0

$$|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle = \chi_-^{(1)}\,\chi_+^{(2)} - \chi_+^{(1)}\,\chi_-^{(2)}$$

Não são 4 combinações ! São 3 + 1 !

$$\left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \\ |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \\ \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right.$$

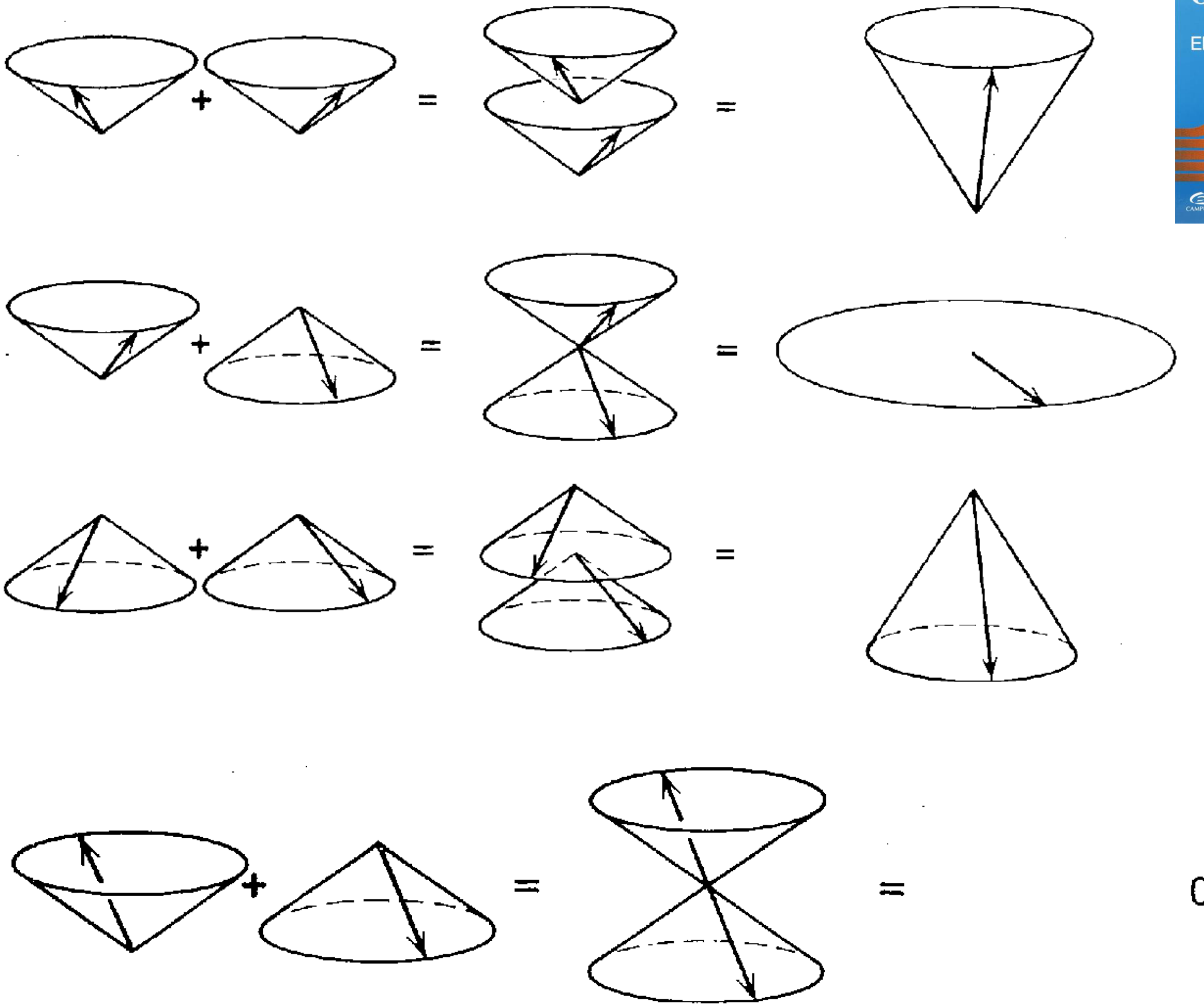
Tripleto de spin 1

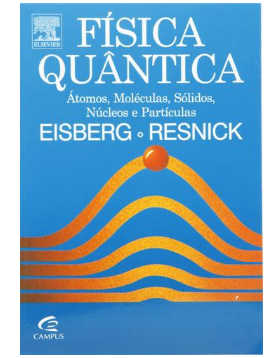
Conectados pelos operadores escada

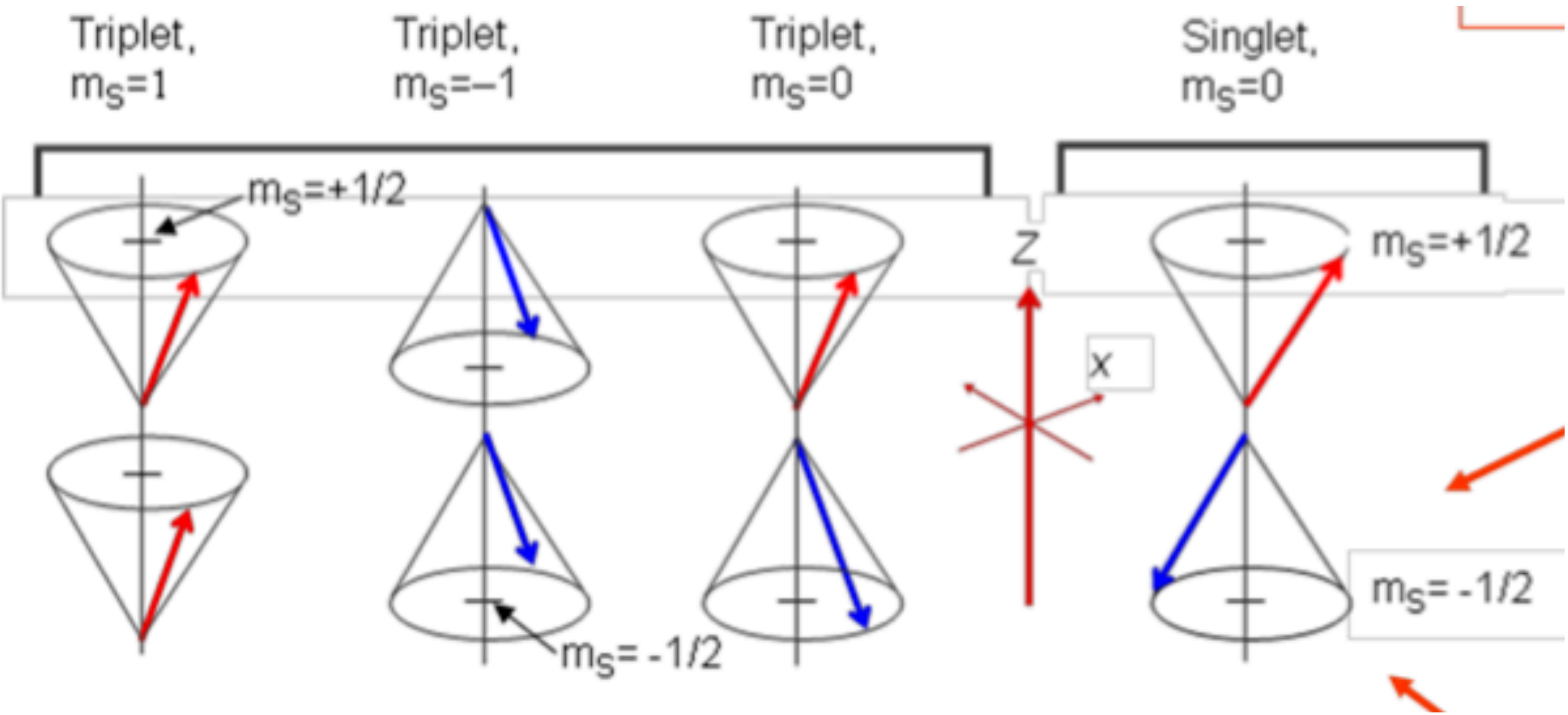
$$|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle$$

Singleto de spin 0

"aniquilado" pela escada


0


FÍSICA
QUÂNTICA
Átomos, Moléculas, Sólidos,
Núcleos e Partículas
EISBERG • RESNICK
CAMPUS



Triplet,
$m_S=1$
Triplet,
$m_S=-1$
Triplet,
$m_S=0$
Singlet,
$m_S=0$
$m_S=+1/2$
$m_S=-1/2$
Z
X
$m_S=+1/2$
$m_S=-1/2$

Simetria de troca da função de onda

$$1 \rightarrow 2 \qquad\qquad 2 \rightarrow 1$$

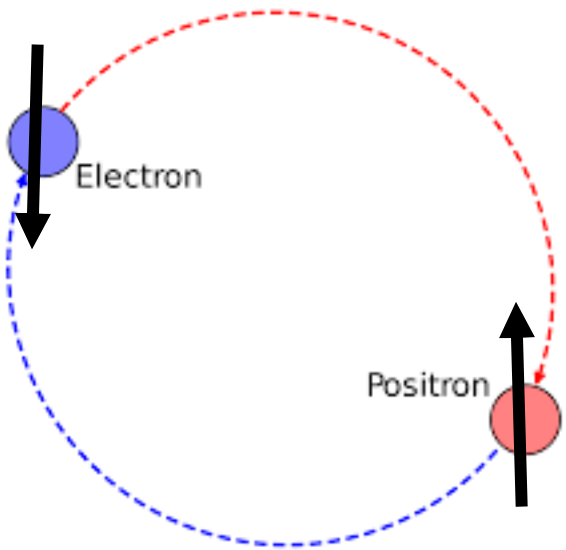
$$\begin{cases} |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \;\rightarrow\; |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \;\rightarrow\; |\downarrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\rangle \;\rightarrow\; |\uparrow\uparrow\rangle \end{cases}$$

Tripleto é simétrico !!!

$$|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \;\rightarrow\; |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle = -\left[\, |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \,\right]$$

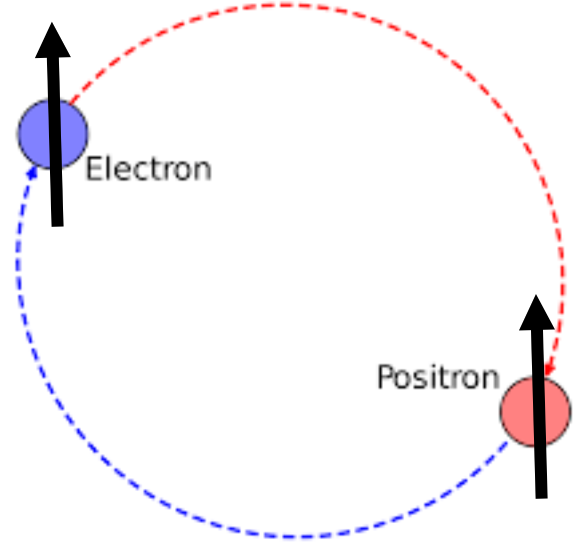
Singleto é antissimétrico !!!

Exemplo: positronium



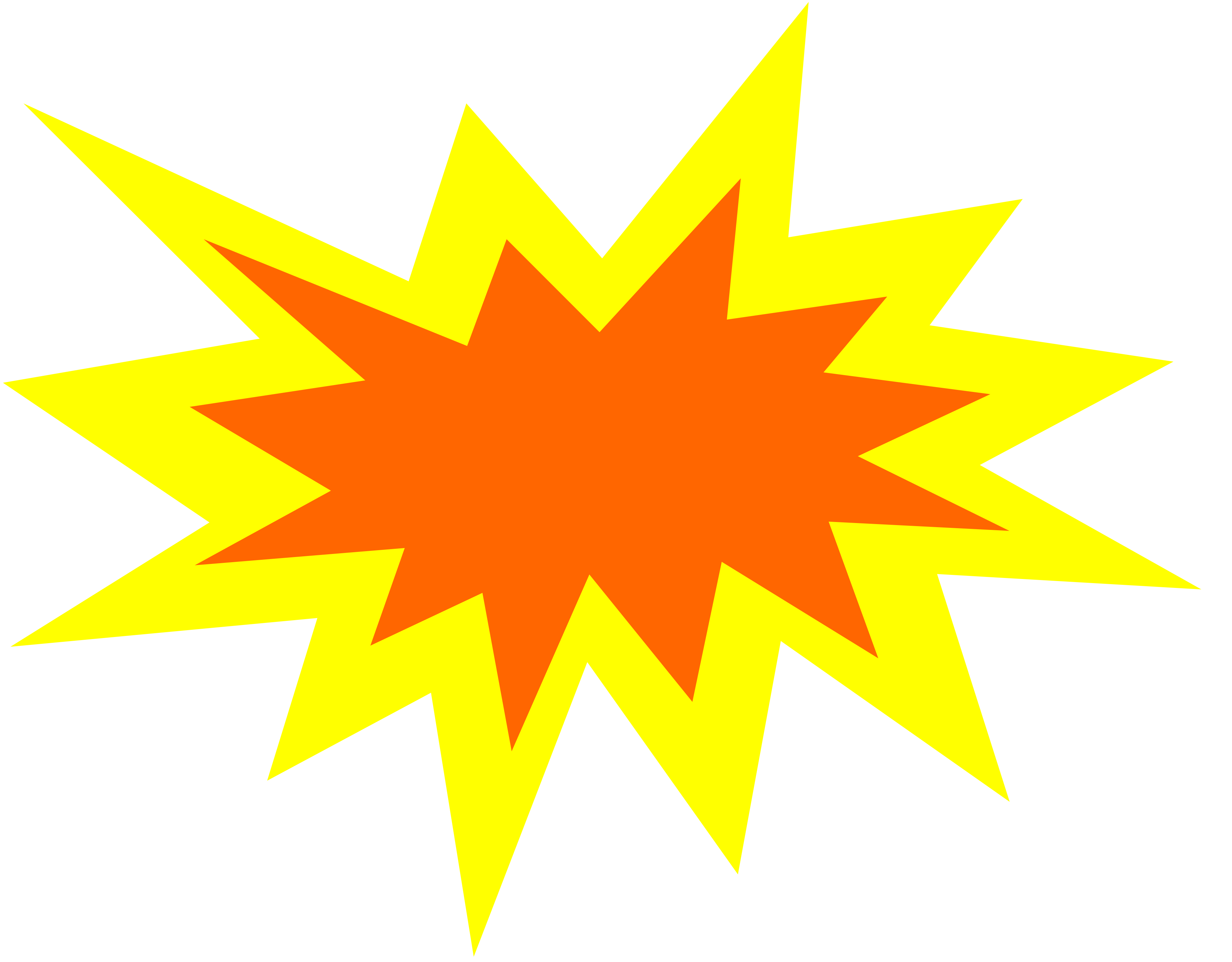
Para-positronium

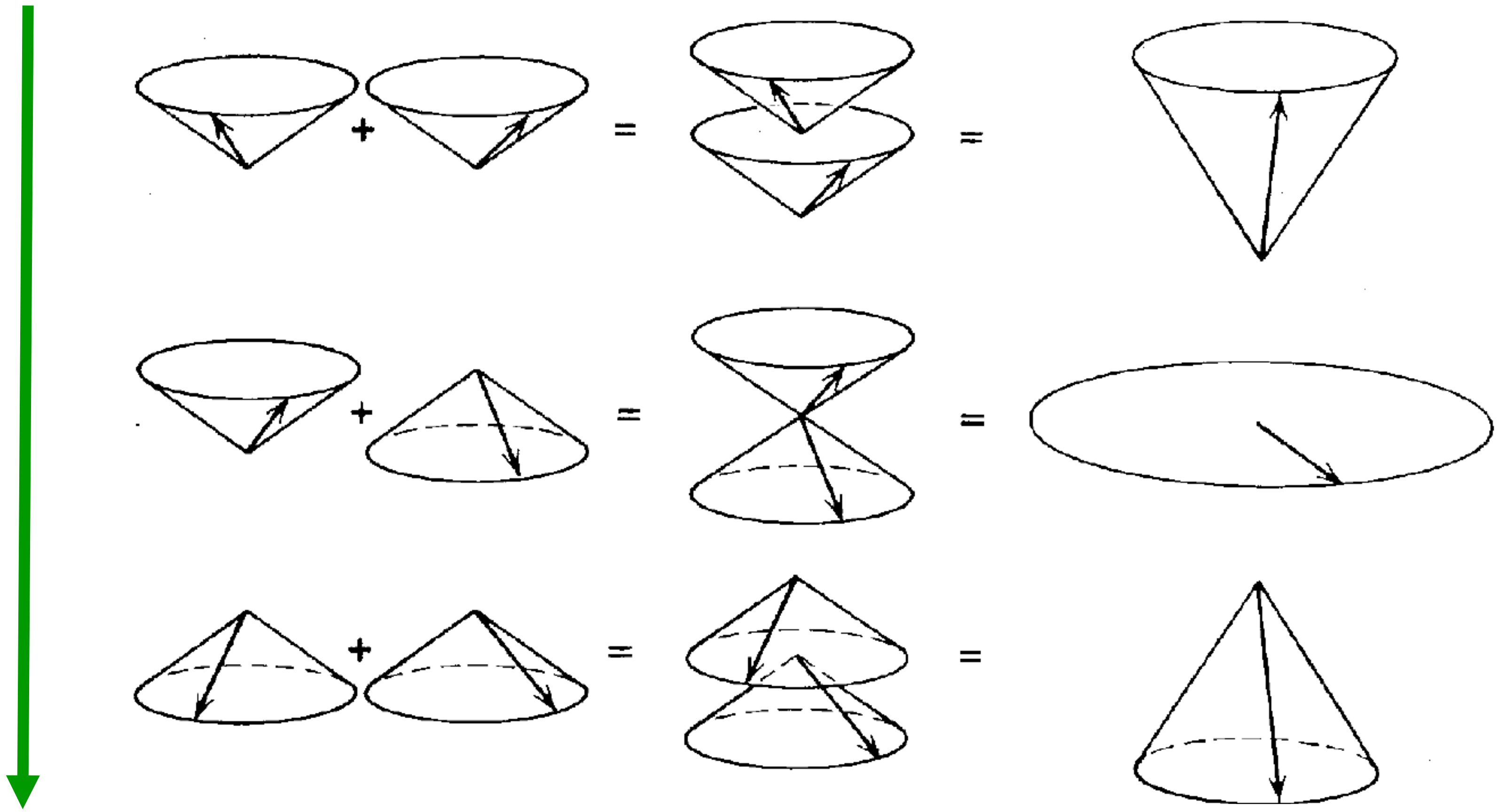
Singleto : $S = 0$



Orto-positronium

Tripleto : $S = 1$



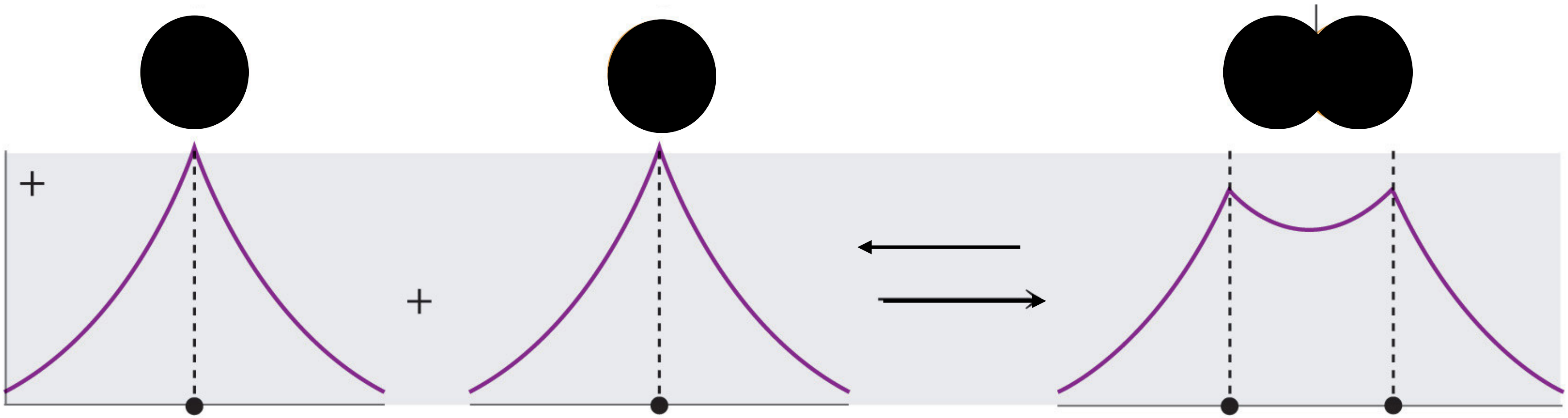


As três combinações estão conectadas pelo operador escada !

O conjunto é chamado tripleto !

Função de onda de duas partículas

Parte espacial :

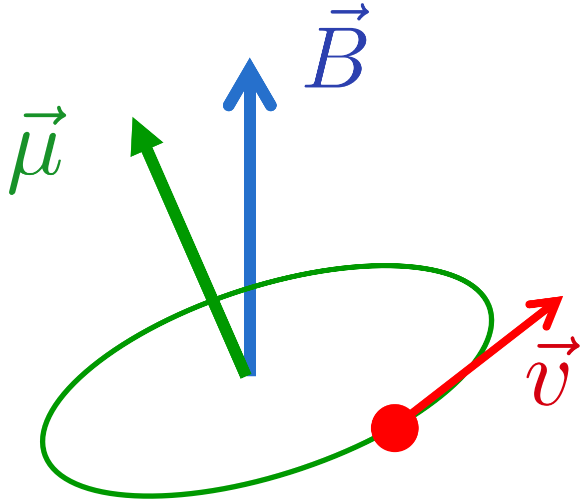


Cada partícula tem uma onda (extensa) associada

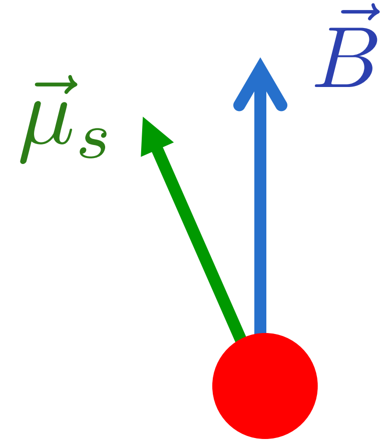
Quando dizer que dois corpos estão realmente separados ?

Partículas não interagentes: $\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$


σ1s
H
H
H
H



$$\vec{B} = B_z\,\hat{k}$$



$$U = -\vec{\mu}\,.\,\vec{B}$$

Carga positiva

$$U = -g_l\,\mu_b\,m_l\,B_z \qquad\qquad U = -g_s\,\mu_b\,m_s\,B_z$$

Carga negativa

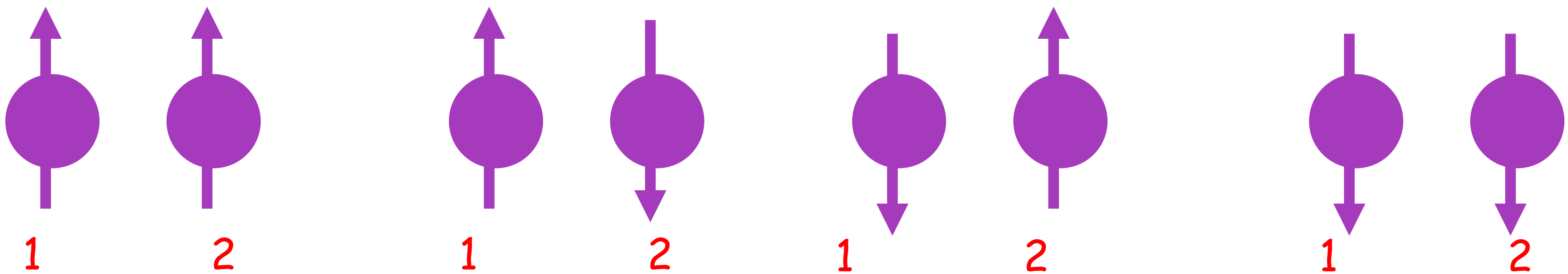
$$U = +g_l\,\mu_b\,m_l\,B_z \qquad\qquad U = +g_s\,\mu_b\,m_s\,B_z$$

Adição de spins

Vamos somar os spins de duas partículas de spin 1/2

Por exemplo: spin total do átomo de hidrogênio

Projeções na direção z



Classicamente somamos os dois vetores de spin:

$$\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$$

Função de onda (autoestado) de spin de duas partículas :

$$|\chi\rangle = |\chi_1\rangle\,|\chi_2\rangle = \chi_1\,\chi_2$$

Autovalor de S_z no estado composto :

$$\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} \quad \longrightarrow \quad \hat{S} = \hat{S}^{(1)} + \hat{S}^{(2)}$$

(operadores)

$$\hat{S}_z = \hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)} \quad \longrightarrow \quad S_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$$

$$S_z\,\chi_1\,\chi_2 = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)})\chi_1\,\chi_2$$

$$S_z \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2$$

$$S_z \chi_1 \chi_2 = S_z^{(1)} \chi_1 \chi_2 + S_z^{(2)} \chi_1 \chi_2$$

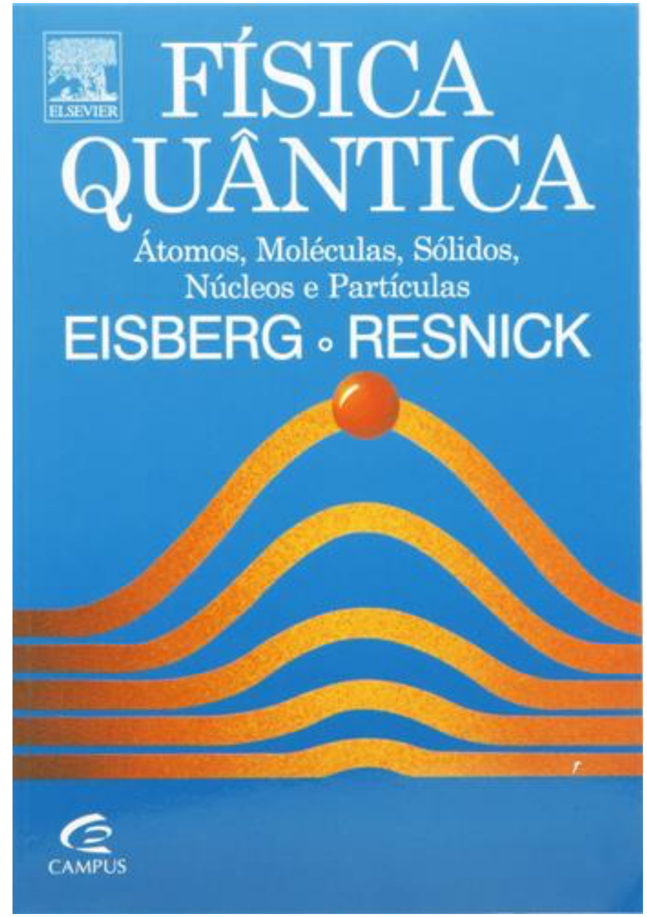
$$S_z \chi_1 \chi_2 = m_1 \hbar \chi_1 \chi_2 + m_2 \hbar \chi_1 \chi_2$$

$$S_z \chi_1 \chi_2 = (m_1 + m_2) \hbar \chi_1 \chi_2$$

$$S_z \chi_1 \chi_2 = m \hbar \chi_1 \chi_2$$

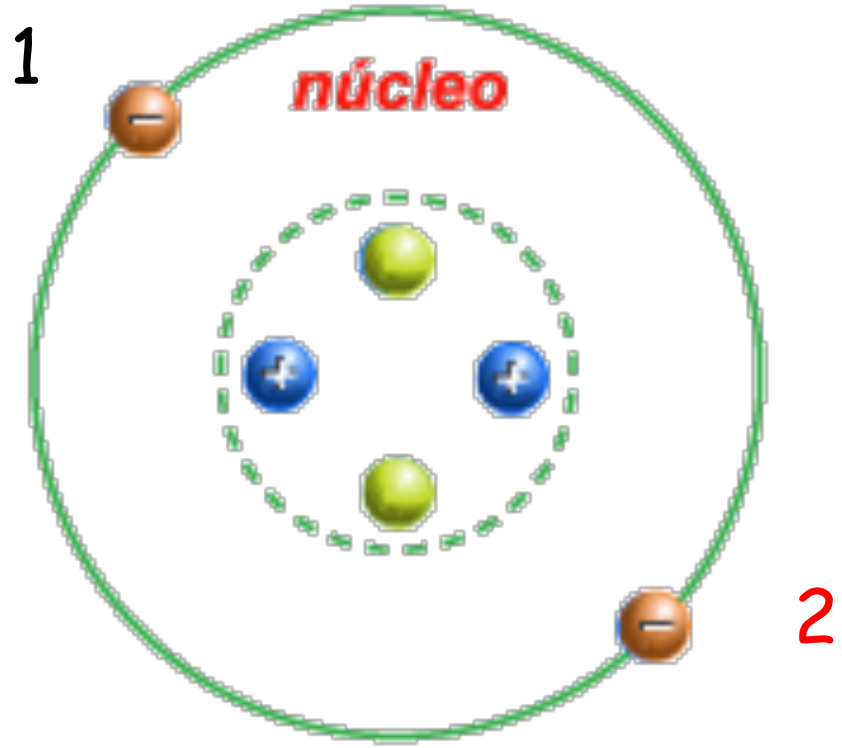
$\uparrow\uparrow$	m = 1	$\downarrow\uparrow$	m = 0
$\uparrow\downarrow$	m = 0	$\downarrow\downarrow$	m = -1

Sistemas de duas partículas



Capítulo 9

Sistemas de duas partículas



átomo de hélio

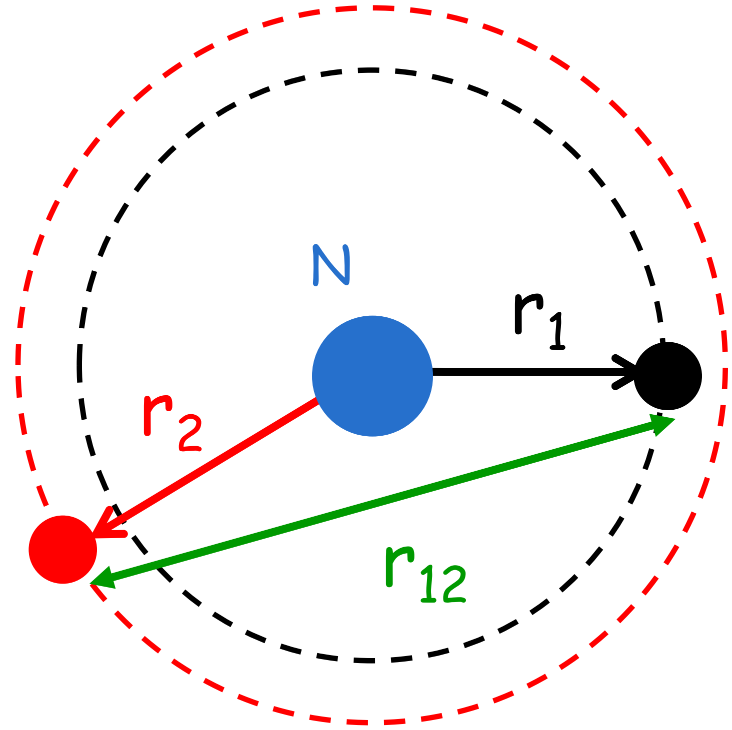
T_1 = energia cinética de 1

V_1 = energia potencial entre 1 e N

T_2 = energia cinética de 2

V_2 = energia potencial entre 2 e N

V_{12} = energia potencial entre 1 e 2



$$H_1 = T_1 + V_1$$

$$H_2 = T_2 + V_2$$

$$H_{12} = V_{12}$$

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}$$

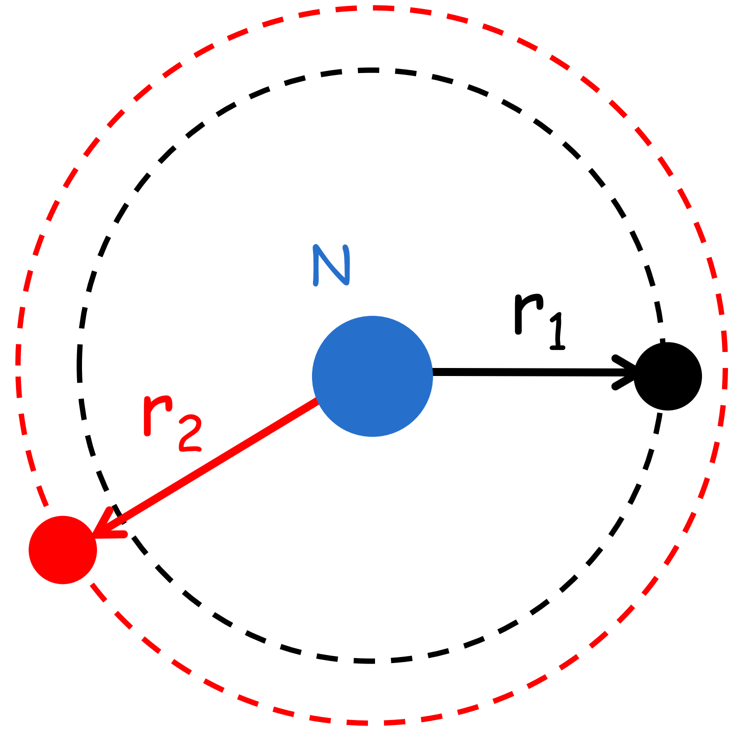
T_1 = energia cinética de 1

V_1 = energia potencial entre 1 e N

T_2 = energia cinética de 2

V_2 = energia potencial entre 2 e N

V_{12} = energia potencial entre 1 e 2



$$H_1 = T_1 + V_1$$

$$H_2 = T_2 + V_2$$

$$H_{12} = 0$$

$$H = H_1 + H_2$$

Desprezamos a interação entre os dois eletrons !!!

Função Hamiltoniana $\longrightarrow$ Operador Hamiltoniano

$$H = H_1 + H_2 \longrightarrow \begin{cases} \hat{H}_1 = -\dfrac{\hbar^2}{2\,m}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1 \\ \hat{H}_2 = -\dfrac{\hbar^2}{2\,m}\dfrac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2 \end{cases}$$

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2\,\psi(x_1,x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2\,\psi(x_1,x_2)}{\partial x_2^2} +$$

$$+ V_1\,\psi(x_1,x_2) + V_2\,\psi(x_1,x_2) = E\,\psi(x_1,x_2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi(x_1,x_2)}{\partial x_1^2}\;-\;\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi(x_1,x_2)}{\partial x_2^2}+V_1\,\psi(x_1,x_2)\;+\;V_2\,\psi(x_1,x_2)\;=\;E\,\psi(x_1,x_2)$$

Ansatz : $\psi(x_1,x_2)\;=\;\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$

Substituimos $\psi(x_1,x_2)\;=\;\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$ e dividimos por $\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_1(x_1)}\,\frac{\partial^2\,\psi_1(x_1)}{\partial x_1^2}\;+\;V_1\;-\;\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_2(x_2)}\,\frac{\partial^2\,\psi_2(x_2)}{\partial x_2^2}\;+\;V_2\;=\;E$$

Passamos as funções de x_2 para o lado direito :

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_1(x_1)}\,\frac{\partial^2\,\psi_1(x_1)}{\partial x_1^2}\;+\;V_1(x_1)\;=\;E\;+\;\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_2(x_2)}\,\frac{\partial^2\,\psi_2(x_2)}{\partial x_2^2}\;-\;V_2(x_2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_1(x_1)}\,\frac{\partial^2\,\psi_1(x_1)}{\partial x_1^2}+V_1(x_1)=E+\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_2(x_2)}\,\frac{\partial^2\,\psi_2(x_2)}{\partial x_2^2}-V_2(x_2)$$

$f(x_1)=g(x_2)$ verdade para qualquer x_1 e x_2 se $f(x_1)=g(x_2)=cte$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_1(x_1)}\,\frac{\partial^2\,\psi_1(x_1)}{\partial x_1^2}+V_1(x_1)=E+\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{1}{\psi_2(x_2)}\,\frac{\partial^2\,\psi_2(x_2)}{\partial x_2^2}-V_2(x_2)=E_1$$

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2\,m}\,\dfrac{1}{\psi_1(x_1)}\,\dfrac{\partial^2\,\psi_1(x_1)}{\partial x_1^2}+V_1(x_1)=E_1\\[2ex]-\dfrac{\hbar^2}{2\,m}\,\dfrac{1}{\psi_2(x_2)}\,\dfrac{\partial^2\,\psi_2(x_2)}{\partial x_2^2}+V_2(x_2)=E-E_1=E_2\end{cases}$$

estas equações têm solução conhecida !!!

Encontramos $\psi(x_1,x_2)=\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$ e $E=E_1+E_2$