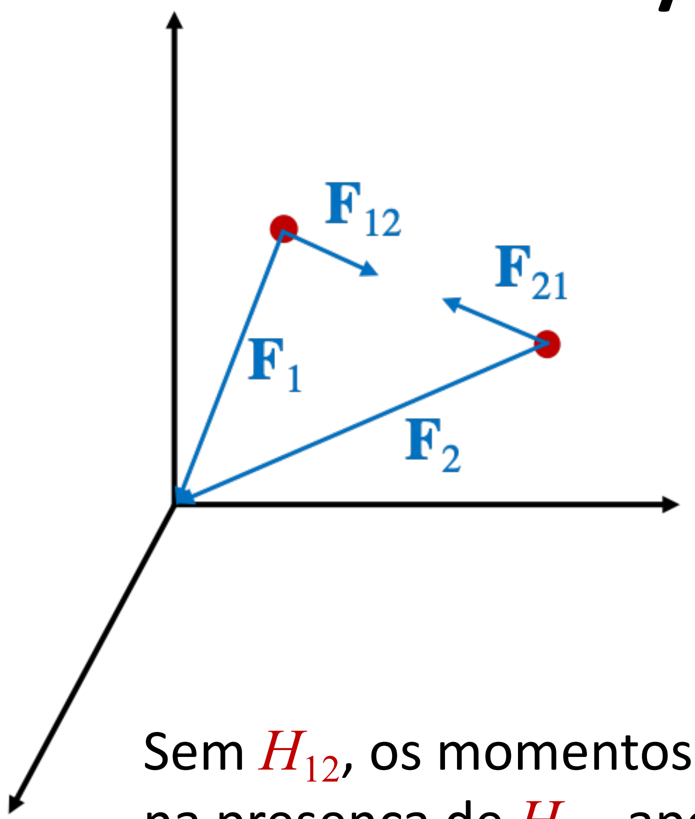
F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023

15/04/2023

Aula 12

Aula passada



Um átomo de dois elétrons.

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

$$H_1 = -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} + V\left(r_1\right)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} + V\left(r_2\right)$$

$$H_{12} = v\left(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

Sem H_{12}, os momentos angulares individuais $\mathbf{L}_1$ e $\mathbf{L}_2$ são conservados mas, na presença de H_{12}, apenas a soma $\mathbf{L}=\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2$ é conservada:

$$[\mathbf{L}_1, H_1 + H_2] = [\mathbf{L}_2, H_1 + H_2] = 0$$

$$[\mathbf{L}_1, H] = [\mathbf{L}_1, H_{12}] \neq 0$$

$$[\mathbf{L}_2, H] = [\mathbf{L}_2, H_{12}] \neq 0$$

$$\boxed{[\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2, H] = 0}$$

Outro exemplo: interação spin-órbita

ÁTOMO DE HIDROGÊNIO, NA APROXIMAÇÃO NÃO RELATIVÍSTICA:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \Rightarrow [H, \vec{L}] = 0$$

EFEITOS RELATIVÍSTICOS: (1) ELÉTRON TEM SPIN ½ $\vec{S} \Rightarrow [H, \vec{S}] = 0$; (2) OUTROS TERMOS NO HAMILTONIANO EM SÉRIE DE POTÊNCIAS DE $\frac{v}{c}$

O MAIS IMPORTANTE É A INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA

$$H_{SO} = \xi(r)\, \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$\xi(r)$ É FUNÇÃO SÓ DE $\underline{r}$

SEGUE QUE: $[\vec{L}, H_{SO}] \neq 0$ E $[\vec{S}, H_{SO}] \neq 0$

MAS: $[\vec{L} + \vec{S}, H_{SO}] = 0$

DE FATO:

$$[L_z, H_{SO}] = [L_z, \xi(r)\vec{L}\cdot\vec{S}] = \xi(r)[L_z, \vec{L}\cdot\vec{S}] + \cancelto{0}{[L_z, \xi(r)]}\vec{L}\cdot\vec{S}$$

MAS: $[L_z, L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z] = [L_z, L_xS_x + L_yS_y]$

$$= [L_z, L_x]S_x + L_x\cancelto{0}{[L_z, S_x]} + [L_z, L_y]S_y + L_y\cancelto{0}{[L_z, S_y]}$$

$$= i\hbar L_yS_x - i\hbar L_xS_y = i\hbar(L_yS_x - L_xS_y) \neq 0$$

$$[L_z, H_{SO}] = \xi(r)\, i\hbar\,(L_yS_x - L_xS_y)$$

ALÉM DISSO: $[S_z, H_{SO}] = [S_z, \xi(r)\vec{L}\cdot\vec{S}] = \xi(r)[S_z, \vec{L}\cdot\vec{S}]$

$$[S_z, \vec{L}\cdot\vec{S}] = [S_z, L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z] = [S_z, L_xS_x + L_yS_y]$$

$$= \cancelto{0}{[S_z, L_x]}S_x + L_x[S_z, S_x] + \cancelto{0}{[S_z, L_y]}S_y + L_y[S_z, S_y]$$

$$= i\hbar(L_xS_y - L_yS_x) \Rightarrow [S_z, H_{SO}] = \xi(r)\, i\hbar\,(L_xS_y - L_yS_x)$$

$\Rightarrow [L_z + S_z, H_{SO}] = 0$; ANALOGAMENTE: $[L_x + S_x, H_{SO}] = [L_y + S_y, H_{SO}] = 0$

Formulação matemática do problema

- TEMOS <u>2</u> MOMENTOS ANGULARES, $(\vec{J}_1, \vec{J}_2)$, QUE COMUTAM ENTRE SI. PORTANTO, EXISTE UMA BASE DE AUTO-VETORES SIMULTÂNEOS DE: $\{J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}\}$

$$\Rightarrow \quad |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \Rightarrow \mathcal{E}(j_1, j_2)$$

$$J_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

$$J_2^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

$$J_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = m_1\hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

$$J_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = m_2\hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

$$m_1 = -j_1, -j_1+1, \ldots, j_1-1, j_1$$

$$m_2 = -j_2, -j_2+1, \ldots, j_2-1, j_2$$

DADO $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, OU SEJA,

$$J_x = J_{1x} + J_{2x}$$
$$J_y = J_{1y} + J_{2y}$$
$$J_z = J_{1z} + J_{2z}$$

ALGUMAS IDENTIDADES:

- $[\vec{J}_1, J_1^2] = 0 = [\vec{J}_1, J_2^2]$ (1)
- $[\vec{J}_2, J_2^2] = 0 = [\vec{J}_2, J_1^2]$ (2)
- (1) E (2) $\Rightarrow$ $[\underbrace{\vec{J}_1 + \vec{J}_2}_{\vec{J}}, J_1^2] = [\underbrace{\vec{J}_1 + \vec{J}_2}_{\vec{J}}, J_2^2] = 0$

$\Rightarrow [\vec{J}, J_1^2] = [\vec{J}, J_2^2] = 0$ (3)

- DE (3), SEGUE QUE: $[J^2, J_1^2] = [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_1^2] = 0$ (4)

E $[J^2, J_2^2] = 0$ (5)

- COMPONENTE z, DE (3):

$[J_z, J_1^2] = [J_z, J_2^2] = 0$ (6)

JUNTANDO (4), (5), (6):

$\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$ FORMAM UM C.O.C.

DADOS OS DOIS CONJUNTOS DE OPERADORES QUE COMUTAM:

$$\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\} \quad — \quad \{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$$

$$\Downarrow$$

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \quad — \quad |\alpha, j_1, j_2, j, m\rangle \leftarrow$$

BASE 2
BASE "NOVA"

BASE 1
BASE "VELHA"

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

ONDE:

$$J^2|\alpha, j_1, j_2, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|\alpha, \dots\rangle$$

$$J_z|\alpha, j_1, j_2, j, m\rangle = m\hbar|\alpha \dots\rangle$$

O PROBLEMA MATEMÁTICO CONSISTE EM:

(1) DADOS (j_1, j_2), QUAIS OS VALORES POSSÍVEIS DE j E QUANTAS VEZES ELES APARECEM?

(2) ACHAR A TRANSFORMAÇÃO DA BASE "VELHA" PARA A "NOVA".

Um caso simples: $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$

$\mathcal{E}(1/2, 1/2) \rightarrow$ DIMENSÃO $\underline{4}$. $(2j_1+1)(2j_2+1) = 2\times 2 = 4$

BASE: $|1/2, 1/2, \pm 1/2, \pm 1/2\rangle \rightarrow |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$ ONDE $\varepsilon_{1,2} = \pm$

$\Rightarrow \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\} \rightarrow$ BASE "VELHA" $\quad \{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$

$J_1^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$; $J_2^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

$J_{1z}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1\frac{\hbar}{2}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$; $J_{2z}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2\frac{\hbar}{2}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

QUEREMOS: $|1/2, 1/2, j, m\rangle \rightarrow |j, m\rangle$ QUAIS j?

1) VAMOS ANALISAR: $J_z = J_{1z} + J_{2z}$

$J_z|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = (J_{1z} + J_{2z})|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

COM ISSO, É FÁCIL CONSTRUIR A MATRIZ DE J_z NA BASE "VELHA"

NA BASE $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$, NESSA ORDEM:

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

2) TOME O ESTADO $|++\rangle$ (DE MAIOR AUTO-VALOR DE J_z) SABEMOS QUE EXISTE A BASE $|j,m\rangle$. NELA, HÁ:

$$J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$$

PORTANTO, HÁ $\boxed{m=1}$, JÁ QUE $J_z|++\rangle = \hbar|++\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{|++\rangle = A|j,m=1\rangle = A|j=1,m=1\rangle} \quad (A=1)$$

COMO ESSE É O MAIOR VALOR DE m, ELE CORRESPONDE A $\boxed{j=1}$, POIS NÃO PODE HAVER $j=2$, JÁ QUE, NESSE CASO, HAVERIA $\underline{m=2}$

3) SE EXISTE $|j=1, m=1\rangle$, TEM QUE EXISTIR

$|j=1, m=0\rangle$ E $|j=1, m=-1\rangle$

É CLARO QUE: $\boxed{|j=1, m=-1\rangle = B|--\rangle}$, POIS

$(B=1)$

$J_z|--\rangle = -\hbar|--\rangle$

JÁ O $|j=1, m=0\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle$

POIS $J_z(\alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle) = 0\hbar(\alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle)$

NÃO IMPORTA OS VALORES DE $\underline{\alpha}$ E $\underline{\beta}$

4) PARA ~~ACHAR~~ $|j=1, m=0\rangle$, APLICO O J_- A $|j=1, m=1\rangle =$

$= |++\rangle$

$$J_-|j=1, m=1\rangle = J_-|++\rangle = (J_{1-} + J_{2-})|++\rangle$$

USANDO: $J_-|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|j, m-1\rangle$

$$J_-|j=1, m=1\rangle = J_-|++\rangle = (J_{1-} + J_{2-})|++\rangle$$

USANDO: $J_-|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|j, m-1\rangle$

$$\Rightarrow J_-|j=1, m=1\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|j=1, m=0\rangle \quad (7)$$

$$\Rightarrow J_{1-}|++\rangle + J_{2-}|++\rangle = \hbar|-+\rangle + \hbar|+-\rangle$$

$$= \hbar\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right] \quad (8)$$

$$(7) = (8) \Rightarrow \cancel{\hbar}\sqrt{2}\,|j=1, m=0\rangle = \cancel{\hbar}\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{|j=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right]}$$

ASSIM, EXISTE $j=1$ TAL QUE:

$$\begin{cases} |j=1, m=1\rangle = |++\rangle \\ |j=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right] \\ |j=1, m=-1\rangle = |--\rangle \end{cases}$$

COMO ESSE 3 ESTADOS, ORTOGONAIS ENTRE SI, GERAM UM ESPAÇO 3D, FALTA UM ÚNICO ESTADO ADICIONAL PARA GERAR A BASE "NOVA" NO ESPAÇO QUADRI-DIMENSIONAL $\mathcal{E}(1/2, 1/2)$.

É CLARO QUE ELE SÓ PODE CORRESPONDER A $j=0$, POIS ESSE É O ÚNICO VALOR DE j COM APENAS UM VALOR DE m POSSÍVEL.

SEGUE TAMBÉM QUE:

$$|j=0, m=0\rangle = \gamma\, |+-\rangle + \delta\, |-+\rangle$$

POIS ELE TEM $J_z = 0$

COMO ELE TEM QUE SER ORTOGONAL A $|j=1, m=0\rangle$

$$\Rightarrow |j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|+-\rangle - |-+\rangle\,\right]$$

CONCLUSÃO: OS VALORES POSSÍVEIS DE j SÃO:

$j = 1$ (UMA VEZ)

$j = 0$ (UMA VEZ)

DADO $j_1 = 1/2$ E $j_2 = 1/2 \Rightarrow j = 0, 1$, UMA VEZ CADA

PODEMOS ESCREVER J^2 NA BASE VELHA.

DA COMUTAÇÃO DE $[J^2, J_z] = 0$ E DA ESTRUTURA DE BLOCOS DE J_z, NA BASE VELHA,:

$$J^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$j = 1 \longrightarrow j(j+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$$

COMO VEREMOS, NO CASO GERAL, DADOS j_1, j_2 QUAISQUER:

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2$$

UMA VEZ APENAS CADA UM