F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
19/05/2023
Aula 13

Aula passada

Motivação: sistemas com duas contribuições de momentos angulares, $\mathbf{J}_1$ e $\mathbf{J}_2$, que não são conservados individualmente mas cuja soma $\mathbf{J}=\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$ é conservada.

$$[\mathbf{J}_1, H] \neq 0$$
$$[\mathbf{J}_2, H] \neq 0$$

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

Nesse caso, não é conveniente usar a base de auto-vetores comuns do

$$\text{C.C.O.C.} \rightarrow \left\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\right\}$$

$$J_1^2 \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle = j_1 \left(j_1 + 1\right) \hbar^2 \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle$$
$$J_2^2 \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle = j_2 \left(j_2 + 1\right) \hbar^2 \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle$$
$$J_{1z} \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle = m_1 \hbar \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle$$
$$J_{2z} \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle = m_2 \hbar \left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle$$

$$m_1 = -j_1, -j_1 + 1, \ldots, j_1 - 1, j_1$$
$$m_2 = -j_2, -j_2 + 1, \ldots, j_2 - 1, j_2$$

Aula passada

Mas: $\left[\mathbf{J}, J_1^2\right] = \left[\mathbf{J}, J_2^2\right] = 0 \Rightarrow \text{C.(C.)O.C.} \rightarrow \left\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\right\}$

$$J_1^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle = j_1 \left(j_1 + 1\right) \hbar^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle$$
$$J_2^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle = j_2 \left(j_2 + 1\right) \hbar^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle$$
$$J^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle = j \left(j + 1\right) \hbar^2 \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle$$
$$J_z \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle = m\hbar \left|j_1, j_2, k, j, m\right\rangle$$

onde o rótulo k serve para distinguir auto-vetores diferentes com o mesmo j,m.
Como veremos, ele será desnecessário, pois os operadores acima formam um CCOC.

O problema consiste em, no sub-espaço de dimensão $(2j_1+1)(2j_2+1)$ com j_1 e j_2 fixos:

a) Achar os valores possíveis de j e quantas vezes cada um aparece (para cada j, m varia em $-j, -j+1,\ldots,j-1,j$).

b) Achar a transformação de uma base para outra.

$$\left|j_1, j_2, m_1, m_2\right\rangle \rightarrow \left|j_1, j_2, j, m\right\rangle$$

Aula passada

Exemplo inicial simples: $j_1 = j_2 = 1/2$

Base inicial: $|j_1 = 1/2, j_2 = 1/2, m_1 = \pm 1/2, m_2 = \pm 1/2\rangle \rightarrow \{|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle\}$

Base final: $|j_1 = 1/2, j_2 = 1/2, j, m\rangle \rightarrow |j, m\rangle$

1. $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ já é diagonal na base inicial:

$$J_z |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \overbrace{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}^{m} \frac{\hbar}{2} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \qquad m = \begin{cases} +\hbar & |{+}{+}\rangle \\ 0 \times \hbar & |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle \\ -\hbar & |{-}{-}\rangle \end{cases}$$

$$J_z = \hbar \left(\begin{array}{c|cc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1 \end{array}\right) ; \; J^2 = \hbar^2 \left(\begin{array}{c|cc|c} a & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & b & c & 0 \\ 0 & d & e & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & f \end{array}\right)$$

J_2 é bloco-diagonal.

2. O valor máximo de m é 1. O auto-vetor é único e, portanto, é auto-vetor de J^2 com $j=1$.

$$|j = 1, m = 1\rangle = |{+}{+}\rangle$$

Aula passada

3. Atue com $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ e encontre os outros auto-vetores com $j=1$.

$$|j=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right)$$

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

4. No sub-espaço de $m=0$ há outro auto-vetor de J_z ortogonal a $|j=1, m=0\rangle$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

Ele é necessariamente auto-vetor de J^2 com $j=0$, pois não outro vetor disponível.

$$|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

5. Finalmente, temos:

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} j_1 = 1/2 \\ j_2 = 1/2 \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{ll} j = 1 & (1\text{x}) \\ j = 0 & (1\text{x}) \end{array}}$$

O caso geral

Notação: Base inicial $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \to |m_1, m_2\rangle$

$$m_1 = -j_1, -j_1+1, \ldots, j_1-1, j_1$$
$$m_2 = -j_2, -j_2+1, \ldots, j_2-1, j_2$$

$$\boxed{\dim\left[\mathcal{E}\left(j_1, j_2\right)\right] = \left(2j_1+1\right)\left(2j_2+1\right)}$$

Base final ("somada"): $|j_1, j_2, k, j, m\rangle \to |k, j, m\rangle$

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

Resultado final (ver a prova nas notas de aula):

1. Os valores possíveis de j são:

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

2. Cada valor de j só aparece uma vez e o k é desnecessário.

$$\left\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\right\} \to \text{C.C.O.C.}$$

Checando a dimensão do espaço

SOMA DAS DIMENSÕES DOS SUB-ESPAÇOS, $|j_1-j_2|$, $|j_1-j_2|+1, \ldots, j_1+j_2-1, j_1+j_2$, DÁ A DIMENSÃO DO ESPAÇO $\mathcal{E}(j_1, j_2) = (2j_1+1)(2j_2+1)$.

$$\text{SOMA} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

VER PROVA
NAS NOTAS

Exemplos

$j_1 = 3 = j_2$:

$j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$

DIMENSÃO: $1 + 3 + 5 + 7 + 9 + 11 + 13 = 49$

$j_1 = 4$; $j_2 = 3/2$:

$j = 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$

$j_1 = 3/2$; $j_2 = 5/2$:

$j = 1, 2, 3, 4$

$j_1 = 1$; $j_2 = 1/2$: $j = 1/2, 3/2$

Exemplos

Se j_1=inteiro e j_2=inteiro:

TODOS OS j SÃO INTEIROS

Se j_1=inteiro e j_2=semi-inteiro (ou vice-versa):

TODOS OS j SÃO SEMI-INTEIROS

Se j_1=semi-inteiro e j_2=semi-inteiro:

TODOS OS j SÃO INTEIROS

Exemplo: $j_1=1$ e $j_2=1$

Notação: base antiga $|1,1;m_1,m_2\rangle$, base nova $|j,m\rangle$

$j=2$:

$$|2,2\rangle = |1,1;1,1\rangle$$

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1,1;1,0\rangle + |1,1;0,1\rangle\right]$$

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\left[|1,1;1,-1\rangle + 2\,|1,1;0,0\rangle + |1,1;-1,1\rangle\right]$$

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

$$|2,-2\rangle = |1,1;-1,-1\rangle$$

$j=1$:

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1,1;1,0\rangle - |1,1;0,1\rangle\right]$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1,1;1,-1\rangle - |1,1;-1,1\rangle\right]$$

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1,1;0,-1\rangle - |1,1;-1,0\rangle\right]$$

$j=0$:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[|1,1;1,-1\rangle - |1,1;0,0\rangle + |1,1;-1,1\rangle\right]$$

Exemplo: $j_1 = l$ e $j_2 = 1/2$

Notação: base antiga $|l, 1/2; m, \varepsilon\rangle$, base nova $|J = l \pm 1/2, M\rangle$

PARA $\ell \geq 1$:

$J=l+1/2$:

$$|l+1/2, M\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M+\frac{1}{2}}\left|l, 1/2; M-\frac{1}{2}, +\right\rangle + \sqrt{l-M+\frac{1}{2}}\left|l, 1/2; M+\frac{1}{2}, -\right\rangle\right]$$

$$M = -\left(l+\frac{1}{2}\right), -l+\frac{1}{2}, \ldots, l-\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}$$

$J=l-1/2$:

$$|l-1/2, M\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M+\frac{1}{2}}\left|l, 1/2; M+\frac{1}{2}, -\right\rangle - \sqrt{l-M+\frac{1}{2}}\left|l, 1/2; M-\frac{1}{2}, +\right\rangle\right]$$

$$M = -\left(l-\frac{1}{2}\right), -l+\frac{3}{2}, \ldots, l-\frac{3}{2}, l-\frac{1}{2}$$

Coeficientes de Clebsch-Gordan

DE MANEIRA GERAL, A TRANSFORMAÇÃO DE BASE É:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \longrightarrow |j_1, j_2, j, m\rangle$$

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle}_{\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle$ = COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN

- POR CONVENÇÃO, SÃO SEMPRE TOMADOS REAIS E SEUS SINAIS TAMBÉM SEGUEM ALGUMAS CONVENÇÕES.
- ALÉM DISSO: $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle = 0$ SE $m \neq m_1 + m_2$

$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ SÓ É DIFERENTE DE ZERO:

SE $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

E UMA SÉRIE DE OUTRAS PROPRIEDADES QUE NÃO VAMOS EXPLORAR AQUI.

Tabelas de coef. de Clebsch-Gordan

$$C_{j'j''}\,(jm;m'm'') \equiv \langle j',j'',m',m''|j,m\rangle$$

j'	j''	j	m	m'	m''	$C_{j'j''}(j\,m\,;\ m'\,m'')$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	+1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	1
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	0	$\pm\frac{1}{2}$	$\mp\frac{1}{2}$	$1/\sqrt{2}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	$\mp\frac{1}{2}$	$\pm1\sqrt{2}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\pm\frac{3}{2}$	±1	$\pm\frac{1}{2}$	1
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\pm\frac{1}{2}$	±1	$\mp\frac{1}{2}$	$\sqrt{1/3}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\pm\frac{1}{2}$	0	$\pm\frac{1}{2}$	$\sqrt{2/3}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\pm\frac{1}{2}$	±1	$\mp\frac{1}{2}$	$\pm\sqrt{2/3}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\pm\frac{1}{2}$	0	$\pm\frac{1}{2}$	$\mp\sqrt{1/3}$
1	1	2	±2	±1	±1	1
1	1	2	±1	±1	0	$1/\sqrt{2}$
1	1	2	±1	0	±1	$1/\sqrt{2}$
1	1	1	±1	±1	0	$\pm1/\sqrt{2}$
1	1	1	±1	0	±1	$\mp1/\sqrt{2}$
1	1	0	0	±1	∓1	$1/\sqrt{3}$
1	1	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$

Problema 1 da lista 4

1. Consider a deuterium atom (composed of a nucleus of spin $I = 1$ and an electron). The electronic angular momentum is $\mathbf{J} = \mathbf{L}+\mathbf{S}$, where $\mathbf{L}$ is the orbital angular momentum of the electron and $\mathbf{S}$ is its spin. The total angular momentum of the atom is $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$, where $\mathbf{I}$ is the nuclear spin. The eigenvalues of $\mathbf{J}^2$ and $\mathbf{F}^2$ are $J(J+1)\hbar^2$ and $F(F+1)\hbar^2$ respectively.

a. What are the possible values of the quantum numbers J and F for a deuterium atom in the $1s$ ground state?

b. Same question for deuterium in the $2p$ excited state.

a) ESTADO 1S: $\ell = 0$

$J = |\ell - 1/2|, \ell + 1/2 \quad (\ell \geq 1)$

$\boxed{J = 1/2} \quad (\ell = 0)$

$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad ; \quad J = 1/2, \; I = 1$

$\boxed{F = 1/2 \text{ ou } 3/2}$

b) ESTADO 2p : $\ell = 1$, $S = 1/2$

$J = \frac{1}{2}$ ou $\frac{3}{2}$, $I = 1$

$F = \frac{1}{2}$ ou $\frac{3}{2}$ $\qquad$ $F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

$$\left[S = 1/2, \ell = 1, J = 1/2, F = \begin{Bmatrix} 1/2 \\ 3/2 \end{Bmatrix} \right]$$

$$\left[S = 1/2, \ell = 1, J = 3/2, F = \begin{Bmatrix} 1/2 \\ 3/2 \\ 5/2 \end{Bmatrix} \right]$$

Problema 2 da lista 4

3. Consider a system composed of two spin 1/2 particles whose orbital variables are ignored. The Hamiltonian of the system is:

$$H = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

where S_{1z} and S_{2z} are the projections of the spins $\mathbf{S}_1$ and $\mathbf{S}_2$ of the two particles onto Oz, and ω_1 and ω_2 are real constants.

a. The initial state of the system, at time $t = 0$, is:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right] \longrightarrow |S=1, m=0\rangle$$

(with the notation of § B of Chapter X). At time t, $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ is measured. What results can be found, and with what probabilities?

b. If the initial state of the system is arbitrary, what Bohr frequencies can appear in the evolution of $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$? Same question for $S_x = S_{1x} + S_{2x}$.

a) $H|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2}(\varepsilon_1\omega_1 + \varepsilon_2\omega_2)|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

$$\left.\begin{aligned} |+-\rangle &\rightarrow E_{+-} = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \\ |-+\rangle &\rightarrow E_{-+} = -\frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \end{aligned}\right\} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{i}{2}(\omega_1-\omega_2)t}|+-\rangle + e^{\frac{i}{2}(\omega_1-\omega_2)t}|-+\rangle\right]$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{i}{2}(\omega_1-\omega_2)t}\,|+-\rangle + e^{\frac{i}{2}(\omega_1-\omega_2)t}\,|-+\rangle\right]$$

$\vec{S}^2 = ?$ $\longrightarrow$ AUTOVALORES DE $\vec{S}^2$ SÃO: $S(S+1)\hbar^2$

$S=0$ OU $S=1$ $\quad \vec{S}^2 \rightarrow \begin{cases} 0\,\hbar^2 \\ 2\hbar^2 \end{cases}$

$P(0\hbar^2) = ?$; $P(2\hbar^2) = ?$

$$P(0\hbar^2) = |\langle S=0, M=0|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle +-| - \langle -+|\right]|\psi(t)\rangle\right|^2$$

$\hookrightarrow |S=0, M=0\rangle$

$$= \frac{1}{4}\left|e^{-\frac{i}{2}(\omega_1-\omega_2)t} - e^{i/2(\omega_1-\omega_2)t}\right|^2$$

$$= \frac{1}{4}\left|-2i\sin\left[\frac{(\omega_1-\omega_2)}{2}t\right]\right|^2 = \sin^2\left[\frac{(\omega_1-\omega_2)}{2}t\right]$$

$$P(2\hbar^2) = \cos^2\left[\frac{(\omega_1-\omega_2)}{2}t\right]$$

$$P(2\hbar^2) = \sum_{m=-1}^{+1} |\langle S=1, m|\psi(t)\rangle|^2$$

$$= |\langle S=1, m=0|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left[\frac{(\omega_1-\omega_2)}{2}t\right]$$

b) A FREQUÊNCIA DE BOHR $\omega_{ij} = \frac{|E_i - E_j|}{\hbar}$ SÓ APARECE NA EVOLUÇÃO TEMPORAL DE $\langle O\rangle(t)$

SE : $\langle\phi_i|O|\phi_j\rangle \neq 0$

PARA $O = \vec{S}^2$

AUTO-ESTADOS DE H SÃO $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

PRECISO SABER QUAL $\langle\varepsilon_1' \varepsilon_2'|\vec{S}^2|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \neq 0$

SE $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = +$: $\vec{S}^2|++\rangle = 1(1+1)\hbar^2|++\rangle = 2\hbar^2|++\rangle$

PORQUE O $|++\rangle = |S=1, m=1\rangle$

$$\overset{E}{(\vec{S}^2)}|--\rangle = 2\hbar^2|--\rangle$$

ASSIM: $\langle \varepsilon_1' \varepsilon_2' | \vec{S}^2 | ++ \rangle \neq 0$ SE $\varepsilon_1' = \varepsilon_2' = +$

$\Rightarrow$ AS DUAS ENERGIAS SÃO IGUAIS $\rightarrow$ NÃO HÁ FREQUÊNCIA DE BOHR, POIS $E_{++} = E_{++} \Rightarrow \omega = 0$

O MESMO VALE PRO $|--\rangle$

$\vec{S}^2 |+-\rangle$