

§ MOMENTUM ANGULAR ORBITAL : \underline{L}

É um caso particular de momentum angular e foi discutido no primeiro semestre. O operador \underline{L} é definido a partir do análogo clássico:

$$\underline{L} \equiv \underline{r} \times \underline{p} \quad (1)$$

Pode ser considerado como gerador infinitesimal das rotações em momentum angular inteiro.

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z\right) |x', y', z'\rangle &= \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi (x p_y - y p_x)\right] |x', y', z'\rangle \\ &= |x' - \delta\phi y', y' + \delta\phi x', z'\rangle \end{aligned}$$

Assim:

$$\langle x', y', z' | \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z\right] |\psi\rangle = \langle x' + \delta\phi y', y' - \delta\phi x', z' | \psi \rangle$$

Mudando de coordenadas cartesianas (x', y', z') para coordenadas polares (r, θ, ϕ)

$$\begin{aligned} |x', y', z'\rangle &\rightarrow |r, \theta, \phi\rangle \\ \langle r, \theta, \phi | \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z\right] |\psi\rangle &= \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \psi \rangle \\ &= \psi(r, \theta, \phi - \delta\phi) = \langle r, \theta, \phi | \psi \rangle - \delta\phi \partial_\phi \langle r, \theta, \phi | \psi \rangle \end{aligned}$$

Assim obtemos:

$$\langle r+\phi | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \langle r+\phi | \hat{L}_z | \psi \rangle = \langle r+\phi | \psi \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r+\phi | \psi \rangle$$

ou:

$$\langle r+\phi | \hat{L}_z | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r+\phi | \psi \rangle$$

Usando um ket posição arbitrário $|r\rangle$ escrevemos:

$$\boxed{\langle r | \hat{L}_z | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r | \psi \rangle}, \quad (2)$$

que é um resultado já obtido em Mecânica Ondulatória.

Analogamente obtemos expressões para \hat{L}_{\pm} :

$$\langle r | \hat{L}_{\pm} | \psi \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle r | \psi \rangle, \quad (3)$$

e finalmente, usando a identidade:

$$L^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+),$$

se obtem

$$\langle r | \hat{L}^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] \langle r | \psi \rangle, \quad (4)$$

onde o operador diferencial que aparece (à parte de um)

fator $\frac{1}{r^2}$) é a parte angular do Laplaciano.

Consideremos agora uma partícula sem spin submetida à um potencial $V(r)$ com simetria esférica. Sabemos que neste caso a equação de Schrödinger é separável em coordenadas esféricas, e os estados estacionários podem ser escritos como:

$$\langle r | n \ell m \rangle = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi), \quad (5)$$

onde $|R\rangle = |r\theta\phi\rangle$ em coordenadas esféricas. Quando o Hamiltoniano é esféricamente simétrico temos

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

com

$$\hat{H} |n\ell m\rangle = E_{n\ell} |n\ell m\rangle,$$

$$\hat{L}^2 |n\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |n\ell m\rangle,$$

$$\hat{L}_z |n\ell m\rangle = \hbar m |n\ell m\rangle,$$

Com $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$, ℓ inteiro.

Os ângulos (θ, ϕ) podem ser caracterizados por um vetor unitário \hat{n} . Isolando a parte angular da função de onda escrevemos:

$$\langle \hat{n} | \ell m \rangle = Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = Y_{\ell}^m(\hat{n})$$

A equação encontrada para \hat{L}_z como operador na representação de coordenadas conduz à:

$$\hat{L}_z | \ell m \rangle = \hbar m | \ell m \rangle$$

$$\langle \hat{n} | \hat{L}_z | \ell m \rangle = \hbar m \langle \hat{n} | \ell m \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n} | \ell m \rangle, \quad R67$$

que fornece:

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n} | \ell m \rangle = m \langle \hat{n} | \ell m \rangle$$

e da dependência $e^{im\phi}$ dos harmônicos esféricos:

$$\frac{\partial}{\partial \phi} Y_\ell^m(\theta, \phi) = im Y_\ell^m(\theta, \phi).$$

Assim também a relação:

$$\hat{L}^2 | \ell m \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) | \ell m \rangle,$$

pode ser transformada numa equação diferencial, multiplicando pelo bra $\langle \hat{n} |$:

$$\langle \hat{n} | \hat{L}^2 | \ell m \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) \langle \hat{n} | \ell m \rangle$$

$$= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \hat{n} | \ell m \rangle$$

ou:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \ell(\ell+1) \right] Y_\ell^m(\theta, \phi) = 0.$$

Desta maneira podemos recuperar os harmônicos esféricos da Mecânica Ondulatória. Também podemos obter as velhas relações de ortogonalidade:

$$\langle e' m' | e m \rangle = \delta_{e e'} \delta_{m m'},$$

e inserindo o conjunto completo $|\hat{n}\rangle$, com

$$\int d\Omega_{\hat{n}} |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1,$$

sendo $d\Omega_{\hat{n}} = \sin\theta d\theta d\phi$ o elemento de ângulo sólido:

$$\delta_{e e'} \delta_{m m'} = \langle e' m' | e m \rangle = \int d\Omega_{\hat{n}} \langle e' m' | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | e m \rangle$$

$$= \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{e' m'}^*(\theta, \phi) Y_{e m}(\theta, \phi)$$

► Exercício. Desenvolva um algoritmo para construir todos os harmônicos esféricos.

Como obter explicitamente os $Y_l^m(\theta, \phi)$?

Usamos propriedades da álgebra de momento angular para o caso de \vec{L} :

$$L_+ |l, l\rangle = 0. \quad (*)$$

Projetando essa equação em $|\hat{n}\rangle = |\theta, \phi\rangle$, como

$\langle \theta, \phi | l, l \rangle = \langle \hat{n} | l, l \rangle = Y_l^l(\theta, \phi)$, obtemos uma eq. diferencial para $Y_l^l(\theta, \phi)$:

$$0 = -i\hbar e^{i\phi} \left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^l(\theta, \phi).$$

Separamos a dependência em ϕ por:

$$Y_l^l(\theta, \phi) = e^{il\phi} f_l(\theta),$$

substituindo em (*), obtemos:

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) f_l(\theta)$$

ou

$$\frac{1}{f(\theta)} \frac{d}{d\theta} f(\theta) = l \cot \theta$$

Resulta:

$$\ln f(\theta) = l \int d\theta \cot \theta = l \ln |\sin \theta|$$

mas em $0 < \theta < \pi$, $\text{sen } \theta > 0$, logo

$$\ln f(\theta) = l \ln \text{sen } \theta = \ln \text{sen } \theta^l$$

Escrevemos a solução como:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = C_l e^{im\phi} \text{sen } \theta^l$$

Normalizamos na parte angular:

$$1 = |C_l|^2 \int_0^{2\pi} d\phi \cdot 1 \int_0^\pi d\theta \text{sen}^{2l+1} \theta$$

com a integral em θ como:

$$\int_0^\pi d\theta \text{sen}^{2l+1} \theta = 2 \cdot \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!} = \frac{2 \cdot 2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!}$$

Finalmente:

$$1 = |C_l|^2 \cdot 2\pi \cdot 2 \cdot \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!}$$

Resultado:

$$|C_l| = \frac{1}{2^l (l!)} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

Por convenção, é adotada uma fase $(-1)^l$ para C_l ,

$$C_l = \frac{(-1)^l}{2^l (l!)} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

Uma vez obtido $Y_l^m(\theta, \phi)$, operando com o operador de descida L_- , podemos gerar os outros Y_l^m , com

$$L_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle.$$

O primeiro fornece:

$$|l, l-1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{2l}} L_- |l, l\rangle$$

projetando na direção \hat{n} :

$$\frac{\langle \hat{n} | L_- |l, m\rangle}{\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}} = \langle \hat{n} | l, m-1\rangle = Y_l^{m-1}(\theta, \phi),$$

com

$$\langle \hat{n} | L_- |l, m\rangle = -i\hbar e^{-i\phi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^m$$

Para $m \geq 0$, resulta a fórmula bem conhecida

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l! \sqrt{4\pi (l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta$$

e se define Y_l^{-m} por (Sakurai, MQM):

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*$$

Uma forma explícita dos HE é:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon_m \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} e^{im\phi} \times (\sin \theta)^{|m|} P_l^{(|m|)}(\cos \theta),$$

com a fase de Condon - Shortley:

$$\epsilon_m = \begin{cases} (-1)^m, & \text{para } m > 0, \\ 1, & \text{para } m \leq 0, \end{cases}$$

onde $P_l^{(|m|)}(\cos \theta) = \frac{d^{(|m|)}}{d \cos \theta^{|m|}} P_l(\cos \theta),$

os $P_l(\cos \theta)$ são os polinômios de Legendre.

APPENDIX I

SPHERICAL HARMONICS IN RECTANGULAR COORDINATES NORMALIZED TO ONE
(Phases as prescribed by Condon and Shortley⁵)

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x - iy}{r}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x + iy}{r}$$

$$Y_2^{-2} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{(x - iy)^2}{r^2}$$

$$Y_2^{-1} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{z(x - iy)}{r^2}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{4}} \frac{3z^2 - r^2}{r^2}$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{z(x + iy)}{r^2}$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{(x + iy)^2}{r^2}$$

$$Y_3^{-3} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{16}} \frac{(x - iy)^3}{r^3}$$

$$Y_3^{-2} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{15}{8}} \frac{z(x - iy)^2}{r^3}$$

$$Y_3^{-1} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{16}} \frac{(x - iy)(5z^2 - r^2)}{r^3}$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{4}} \frac{z(5z^2 - 3r^2)}{r^3}$$

$$Y_3^1 = -\sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{16}} \frac{(x + iy)(5z^2 - r^2)}{r^3}$$

$$Y_3^2 = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{15}{8}} \frac{z(x + iy)^2}{r^3}$$

$$Y_3^3 = -\sqrt{\frac{7}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{16}} \frac{(x + iy)^3}{r^3}$$

$$\begin{aligned}
 Y_4^{-4} &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{128}} \frac{(x-iy)^4}{r^4} \\
 Y_4^{-3} &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{16}} \frac{z(x-iy)^3}{r^4} \\
 Y_4^{-2} &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{32}} \frac{(x-iy)^2}{r^4} (7z^2 - r^2) \\
 Y_4^{-1} &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{16}} \frac{(x-iy)}{r^4} (7z^3 - 3zr^2) \\
 Y_4^0 &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{64}} \frac{35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4}{r^4} \\
 Y_4^1 &= -\sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{16}} \frac{(x+iy)}{r^4} (7z^3 - 3zr^2) \\
 Y_4^2 &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{5}{32}} \frac{(x+iy)^2}{r^4} (7z^2 - r^2) \\
 Y_4^3 &= -\sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{16}} \frac{z(x+iy)^3}{r^4} \\
 Y_4^4 &= \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{128}} \frac{(x+iy)^4}{r^4}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Y_6^{-5} &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{63}{256}} \frac{(x-iy)^5}{r^5} \\
 Y_6^{-4} &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{315}{128}} \frac{z(x-iy)^4}{r^5} \\
 Y_6^{-3} &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{256}} \frac{(x-iy)^3}{r^5} (9z^2 - r^2) \\
 Y_6^{-2} &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{105}{32}} \frac{(x-iy)^2}{r^5} (3z^3 - zr^2) \\
 Y_6^{-1} &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{15}{128}} \frac{(x-iy)}{r^5} (21z^4 - 14z^2r^2 + r^4) \\
 Y_6^0 &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \frac{1}{8} \frac{63z^5 - 70z^3r^2 + 15zr^4}{r^5} \\
 Y_6^1 &= -\sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{15}{128}} \frac{x+iy}{r^5} (21z^4 - 14z^2r^2 + r^4) \\
 Y_6^2 &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{105}{32}} \frac{(x+iy)^2}{r^5} (3z^3 - zr^2) \\
 Y_6^3 &= -\sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{35}{256}} \frac{(x+iy)^3}{r^5} (9z^2 - r^2) \\
 Y_6^4 &= \sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{315}{128}} \frac{z(x+iy)^4}{r^5} \\
 Y_6^5 &= -\sqrt{\frac{11}{4\pi}} \sqrt{\frac{63}{256}} \frac{(x+iy)^5}{r^5}
 \end{aligned}$$

§ TEORIA FORMAL DA ADIÇÃO DE MOMENTOS ANGULARES

Consideremos dois operadores de momento angular (em espaços diferentes) \tilde{J}_1 e \tilde{J}_2 . As componentes de ambos satisfazem as relações de comutação de momentum angular:

$$[J_{1m}, J_{1n}] = i\hbar \epsilon_{mnk} J_{1k}, \quad m, n, k = 1, 2, 3 \quad (1)$$

$$[J_{2m}, J_{2n}] = i\hbar \epsilon_{mnk} J_{2k}, \quad m, n, k = 1, 2, 3.$$

Porém todas as relações de comutação entre eles são nulas:

$$[J_{1k}, J_{2m}] = 0, \quad k, m = 1, 2, 3. \quad (2)$$

► Def. MOMENTUM ANGULAR TOTAL: \tilde{J} (\otimes significa produto tensorial)

$$\tilde{J} \equiv \tilde{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \tilde{J}_2 \quad (3)$$

A def. (3) é mais comumente escrita como:

$$\tilde{J} = \tilde{J}_1 + \tilde{J}_2$$

⊙ operador infinitesimal de rotação que afeta ambos espaços 1 e 2 e

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \tilde{J}_1 \cdot \hat{n} \right) \otimes \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \tilde{J}_2 \cdot \hat{n} \right) \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi (\tilde{J}_1 \otimes 1 + \tilde{J}_2 \otimes 1) \cdot \hat{n} \quad (4) \end{aligned}$$

e a rotação finita é também obtida como um produto tensorial:

$$\mathcal{D}_1(R) \otimes \mathcal{D}_2(R) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \phi(\vec{J}_1 \cdot \vec{n})\right\} \otimes \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \phi(\vec{J}_2 \cdot \vec{n})\right\},$$

e como os operadores \vec{J}_1 e \vec{J}_2 comutam entre si, obtemos

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}_1(R) \otimes \mathcal{D}_2(R) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \phi(\vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2) \cdot \vec{n}\right\}$$

Gracias as relações de comutação (1) e (2) obtemos:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k, \quad (5)$$

que mostra que $\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2$ é um operador de momentum angular: é o gerador das rotações infinitesimais no espaço completo. Sendo \vec{J} um operador de momentum angular, podemos aplicar todo o que sabemos sobre operadores de momentum angular. Definem-se os operadores J^2, J_z, J_{\pm} , e construa-se o espectro da maneira conhecida.

Na escolha dos autoestados temos duas opções:

A) Escolher como conjunto de operadores compatíveis a

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

A base que diagonaliza este conjunto simultaneamente é denotada por

$$\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$$

Esta base não é mais que o produto tensorial das bases que diagonalizam (J_1^2, J_{1z}) e (J_2^2, J_{2z}) respectivamente:

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle,$$

ou mais brevemente:

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

As relações para autovalores e autoestados são:

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

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

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

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

Estas relações na verdade devem ser entidades como:

$$\begin{aligned} J_1^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= (J_1^2 \otimes 1) |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \\ &= J_1^2 |j_1 m_1\rangle \otimes 1 |j_2 m_2\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \end{aligned}$$

B) O operador J^2 pode ser escrito como:

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+},$$

$$\begin{aligned} \text{porque } J^2 &= (\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)^2 = \tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2^2 + \tilde{J}_1 \cdot \tilde{J}_2 + \tilde{J}_2 \cdot \tilde{J}_1 \\ &= \tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2^2 + 2\tilde{J}_1 \cdot \tilde{J}_2, \quad \text{e} \end{aligned}$$

$$\tilde{J}_1 \cdot \tilde{J}_2 = J_{1z}J_{2z} + \frac{1}{2}(J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+})$$

Portanto temos como consequência:

$$[J_1^2, J_1^2] = [J_1^2, J_2^2] = 0$$

Também: $[J_2, J_1^2] = [J_{1z} + J_{2z}, J_1^2] = [J_2, J_2^2] = 0$

Assim uma outra opção de operadores compatíveis é

$$(J_1^2, J_2, J_1^2, J_2^2)$$

Para a base que diagonaliza simultaneamente estes operadores escrevemos:

$$\{|j_1 j_2 j m\rangle\},$$

de maneira que:

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

$$J_z |j_1 j_2 j m\rangle = \hbar m |j_1 j_2 j m\rangle$$

$$J_1^2 |j_1 j_2 j m\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1 j_2 j m\rangle$$

$$J_2^2 |j_1 j_2 j m\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1 j_2 j m\rangle.$$

Para abreviar, esta base é comumente escrita simplesmente como $\{|j m\rangle\}$. É importante notar que mesmo tendo

$$[J^2, J_z] = 0,$$

não temos $[J^2, J_{1z}] = 0$ ou $[J^2, J_{2z}] = 0$.

Em efeito é fácil verificar que

$$[J^2, J_{1z}] = [J_1^2 + J_2^2 + 2 J_{1z} J_{2z} + 2 J_{1x} J_{2x} + 2 J_{1y} J_{2y},$$

$$J_{12} = 2 [J_{1x}, J_{1z}] J_{2x} + 2 [J_{1y}, J_{1z}] J_{2y} \\ = 2ik (J_{1x} J_{2y} - J_{1y} J_{2x}) \neq 0$$

Assim A) e B) representam conjuntos máximos de operadores compatíveis. Deve portanto existir uma transformação unitária que ligue a base $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ com a base $\{|j_1 j_2; j m\rangle\}$.

Amboos conjuntos são também completos. Escrevemos então:

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle, \quad (6)$$

com a relação de completudeza:

$$\sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | = 1,$$

onde a unidade $\bar{1}$ é o operador unidade no subespaço de j_1 e j_2 dados.

► Def: COEFICIENTES de CLEBSCH-GORDAN

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle$$

(7)

Propriedades dos Coeficientes de Clebsch - Gordan (CG) R52

i) Os coeficientes de Clebsch-Gordan são nulos exceto no caso

$$m = m_1 + m_2 \quad (8)$$

Dem. Aplicar $(J_2 - J_{12} - J_{22})$ sobre $|j_1 j_2; j m\rangle$

$$0 = \hbar m |j_1 j_2; j m\rangle - (J_{12} + J_{22}) |j_1 j_2; j m\rangle$$

Multiplicando agora pelo bra $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$:

$$0 = \hbar m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle - \hbar (m_1 + m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$$

onde usamos o fato que todos os operadores são hermiteanos.

Assim:

$$0 = (m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \quad \text{c.q.d.}$$

ii) Os coeficientes de C-G são nulos quando não se satisfaz

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (9)$$

Dem. Sem demonstração (lista de exercícios). Esta propriedade é óbvia, pensando no modelo vetorial para o momentum angular.

Podemos checar esta propriedade, pensando que a dimensão dos espaços gerados por ambas as bases deve ser a mesma. Assim para $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ a dimensão é (com j_1, j_2 fixos):

$$D = (2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$$

Deveríamos obter o mesmo resultado se a propriedade (9) é verdadeira:

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

Suponhamos, para fixar idéias que $j_1 \geq j_2$. Seja

$$j_1 - j_2 = k_0 \geq 0, \quad j_1 + j_2 = k_1$$

$$\text{com } k_0 + k_1 + 1 = 2j_1 + 1, \quad \dots, \quad k_1 - k_0 + 1 = 2j_2 + 1$$

Assim escrevemos:

$$D' = \sum_{j=0}^{k_1} 2j - \sum_{j=0}^{k_0-1} 2j + k_1 - k_0 + 1$$

$$= \frac{1}{2} \cdot 2 k_1 (k_1 + 1) - \frac{1}{2} \cdot 2 (k_0 - 1) k_0 + k_1 - k_0 + 1$$

$$= k_1^2 + k_1 - k_0^2 + k_0 + k_1 - k_0 + 1$$

$$= (k_1 + k_0)(k_1 - k_0) + (k_1 + k_0) + k_1 - k_0 + 1$$

$$= (k_1 + k_0)(k_1 - k_0 + 1) + k_1 - k_0 + 1$$

$$= (k_1 + k_0 + 1)(k_1 - k_0 + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = D$$

Esta contagem faz com que seja razoável pensar que a propriedade (9) é verdade.

iii) Os coeficientes de C-G formam uma matriz unitária (representam uma mudança da base no nosso espaço de

Hilbert). Por convenção eles são tomados como sendo reais

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ &= \sum_{j, m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\ &= \sum_{j m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m \rangle^* \end{aligned}$$

sendo reais:

$$\delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} = \sum_{j m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m \rangle$$

\Rightarrow A matriz dos coeficientes de C-G é a inversa dela mesma. Esta propriedade é a propriedade de uma matriz ortogonal:

$$\sum_{j, m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$$

(10)

Também temos a propriedade inversa:

$$\begin{aligned} \delta_{j j'} \delta_{m m'} &= \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; j' m' \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle \end{aligned}$$

e outra vez, usando o fato de serem reais

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m m'} \quad (11)$$

Caso especial, $j = j'$, $m = m' = m_1 + m_2$

$$1 = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$$

$$= \sum_{m_1, m_2} |\langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle|^2 \quad (12)$$

que é a condição de normalização de $|j_1 j_2; j m\rangle$.

§ Relações de recorrência para os coeficientes de C-G.

Simplificamos a nossa notação para

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \equiv \langle m_1 m_2 | j m \rangle$$

As relações de recorrência podem ser encontradas operando com os operadores escalares J_{\pm} sobre $|j m\rangle$:

$$J_{\pm} |j m\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | j m \rangle$$

$$(J_{1\pm} + J_{2\pm}) |m_1 m_2\rangle = (J_{1\pm} |m_1\rangle) |m_2\rangle + |m_1\rangle (J_{2\pm} |m_2\rangle)$$

$$= \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |m_1 \pm 1, m_2\rangle +$$

$$+ \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |m_1, m_2 \pm 1\rangle$$

mas o lado esquerdo é

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle = \sum_{m_1, m_2} \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |m_1 \pm 1, m_2\rangle \cdot \langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

$$+ \sum_{m_1, m_2} \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |m_1, m_2 \pm 1\rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

Multiplicamos agora pelo bra $\langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | = \langle m'_1 m'_2 |$

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m'_1 m'_2 | j, m \pm 1 \rangle =$$

$$= \sum_{m_1, m_2} \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} \langle m'_1 m'_2 | m_1 \pm 1, m_2 \rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle +$$

$$+ \sum_{m_1, m_2} \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} \langle m'_1 m'_2 | m_1, m_2 \pm 1 \rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

Os produtos escalares fornecem:

$$\langle m'_1 m'_2 | m_1 \pm 1, m_2 \rangle = \delta_{m'_1 m_1 \pm 1} \delta_{m'_2 m_2}$$

$$\langle m'_1 m'_2 | m_1, m_2 \pm 1 \rangle = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2 \pm 1}$$

e assim:

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m'_1 m'_2 | j, m \pm 1 \rangle =$$

$$= \sqrt{[j_1 \mp (m'_1 \mp 1)][j_1 \pm (m'_1 \mp 1) + 1]} \langle m'_1 \mp 1, m'_2 | j, m \rangle +$$

$$+ \sqrt{[j_2 \mp (m_2' \mp 1)][j_2 \pm (m_2' \mp 1) + 1]} \langle m_1', m_2' \mp 1 | j m \rangle$$

As raízes fornecem:

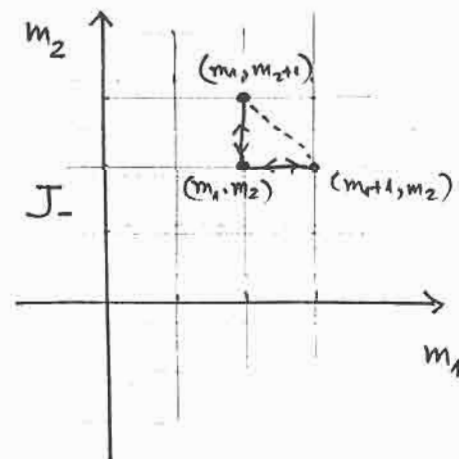
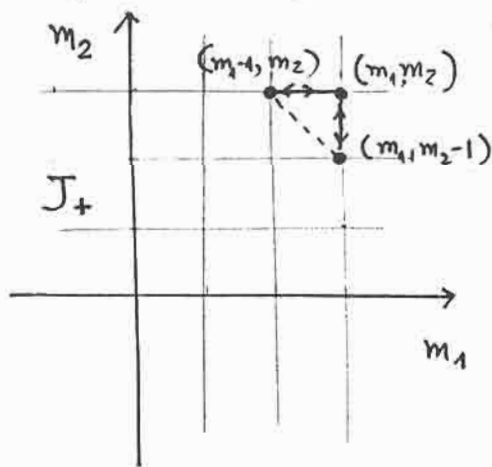
$$\sqrt{(j_1 \mp m_1' + 1)(j_1 \pm m_1')} \text{ e } \sqrt{(j_2 \mp m_2' + 1)(j_2 \pm m_2')}$$

A relação de recorrência fica:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m_1 m_2 | j, m \pm 1 \rangle &= \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j m \rangle + \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j m \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Que pode ser usada para gerar recursivamente os coeficientes de C-G.

Regras de seleção: $m \pm 1 = m_1 + m_2$



As relações de recorrência, a condição de serem reais, e a normalização determinam (quase que) univocamente os coeficientes de C-G (exceto por algumas convenções diferentes de sinais). A estratégia para determinar todos os coeficientes é a seguinte:

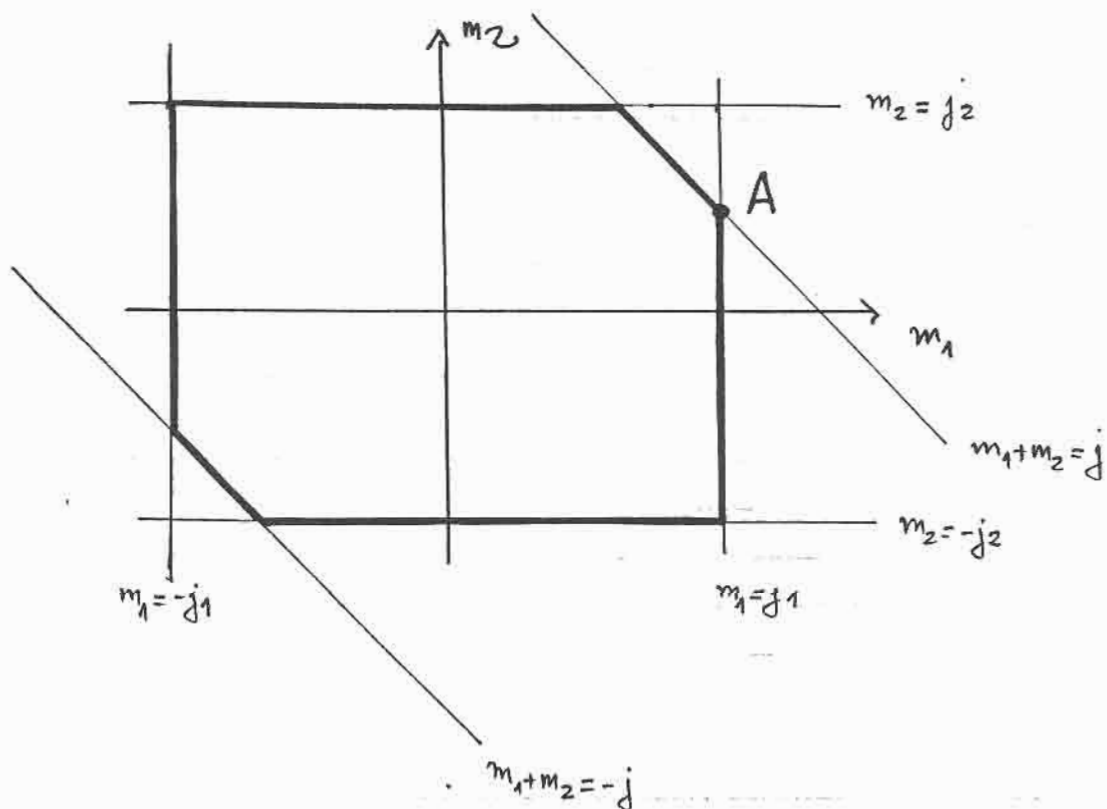
i) fixamos os limites no plano (m_1, m_2)

$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2,$$

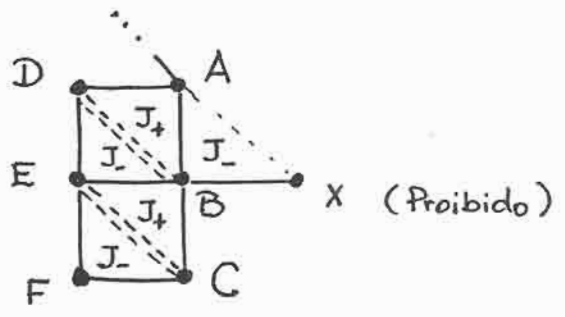
$$-j \leq m = m_1 + m_2 \leq j$$

Estas últimas condições podem ser escritas (no caso limite):

$$m_2 = \pm j - m_1$$



ii) Começamos a construção a partir de um vértice, digamos o ponto A



Aplicações de J_- : liga A com B (X é proibido)

Aplicações de J_+ : liga (A,B) com D

Aplicações de J_- : liga (B,D) com E , ...

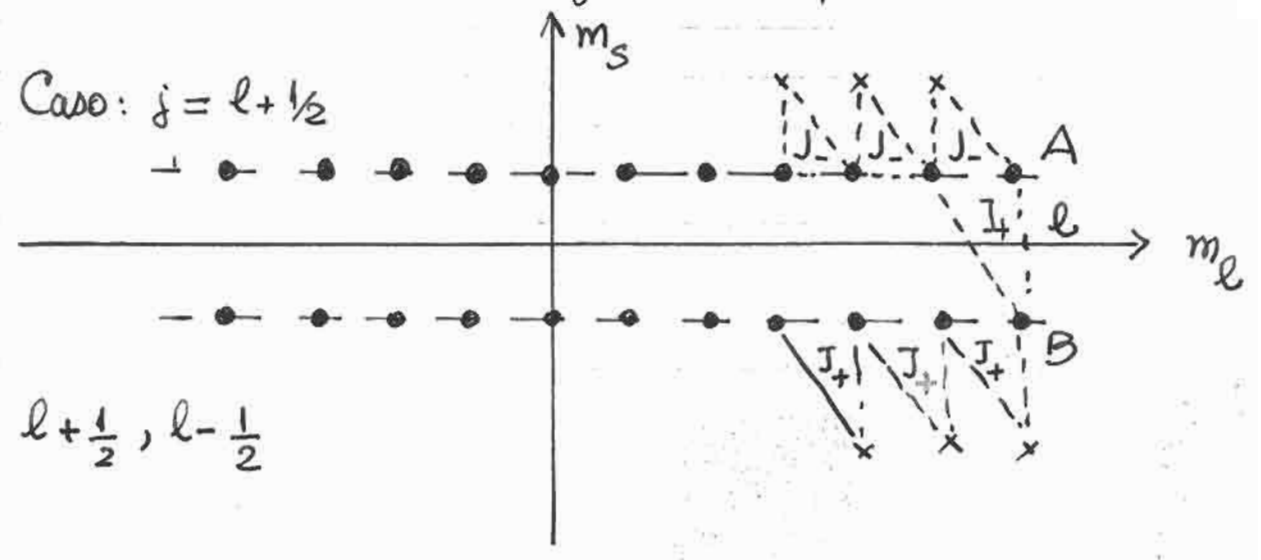
e assim sucessivamente .

Resultado : obtemos todos os coeficientes de C-G em função daquele de A. O módulo deste último é obtido usando a fórmula de normalização. Fica um sinal indeterminado (é escolhido por convenção)

► Exercício. Trabalhar o caso

$$j_1 = l > 0 \text{ inteiro, e } j_2 = \frac{1}{2} = s,$$

que corresponde a adicionar (por exemplo) o momento orbital com o momento angular de spin.



Caso: $j = l + \frac{1}{2}$

$$j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}$$

Das relações de recorrência para os coeficientes de Clebsch-Gordan, vemos que além da regra de seleção

$$m = m_1 + m_2,$$

temos outra, $j' = j$, isto é coeficientes de diferentes j 's totais não se misturam (se fala que o espaço produto foi reduzido em soma de representações irredutíveis do grupo de rotações: cada subespaço com j total definido é um subespaço invariante).

O espaço dos $\{|j m\rangle\}$ para j fixo, tem dimensão $(2j+1)$. Assim um determinado $|j m\rangle$ é no máximo, uma combinação linear de $(2j+1)$ funções produto $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$, com $m = m_1 + m_2$

$$|j m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

3. Exemplo de Adição

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$$

$|JM\rangle$ são os estados de momentum angular total J com projecção M , isto é

$$|j_1 j_2; JM\rangle$$

Da lei de adição sabemos que:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2,$$

e neste caso $J = 0, 1$ (um singleto e um tripleto)

Também temos

$$J_z = J_{1z} + J_{2z},$$

de maneira que as projeções se somam. Mostramos abaixo duas maneiras possíveis de construir os estados $|JM\rangle$:

i) Usando os operadores escada:

$$J_{\pm} |JM\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} |J, M\pm 1\rangle$$

Construímos primeiro a função com M máximo. Neste caso

$$M = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.$$

Esse ket só pode ter $J=1$, portanto:

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 11\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

onde $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ são os autoestados de J_1 e J_{1z} (respectivamente de J_2, J_{2z}). Construímos os outros kets usando os operadores escada (J_- neste caso):

$$J_- |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 11\rangle = \hbar \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 1, 0\rangle$$

$$= \hbar \sqrt{2} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 10\rangle$$

$$= (J_{1-} + J_{2-}) |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

$$= (J_{1-} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle) |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle (J_{2-} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle)$$

$$= \hbar \left(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$$

Escrevemos os kets individuais como:

$$|\pm\rangle_1, |\pm\rangle_2$$

Assim:

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|-\rangle_1 |+\rangle_2 + |+\rangle_1 |-\rangle_2 \right)$$

e

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

Aplicamos J_- mais uma vez:

$$J_- |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 10\rangle = \hbar \sqrt{2} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 1\bar{1}\rangle$$

$$= (J_{1-} + J_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|-\rangle_1 |+\rangle_2 + |+\rangle_1 |-\rangle_2 \right)$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |-\rangle_1 |-\rangle_2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |-\rangle_1 |-\rangle_2 = \frac{2\hbar}{\sqrt{2}} |-\rangle_1 |-\rangle_2$$

ou:

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 1\bar{1}\rangle = |-\rangle_1 |-\rangle_2$$

Só está faltando o ket $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 00\rangle$ que deve ser um estado ortogonal a $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 10\rangle$.

Solução:

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|-\rangle_1 |+\rangle_2 - |+\rangle_1 |-\rangle_2 \right)$$

ii) Outra possibilidade, aproveitando o formulário, é usar a tabela dos coeficientes de Clebsch-Gordan:

a) Neste caso $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$

$J = 1, 0$

	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$J = 1$	$\sqrt{\frac{M+1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1-M}{2}}$
$J = 0$ ($M=0$)	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$J=1 \begin{cases} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 11\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2 \\ |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle_1 |+\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_1 |-\rangle_2 \\ |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 1\bar{1}\rangle = |-\rangle_1 |-\rangle_2 \end{cases}$$

$$J=0 \begin{cases} |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_1 |-\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle_1 |+\rangle_2 \end{cases}$$

Exemplo 2. Acoplamento 1×1 , $\hbar \equiv 1$

Da regra $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}$,

obtemos

$$D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}$$

Do acoplamento resulta representações com J total

$$j = 2, 1, 0$$

Construímos todos os estados $|j m\rangle$ em termo dos produtos

$$|1 m_1\rangle |1 m_2\rangle \equiv |m_1\rangle |m_2\rangle.$$

A estratégia é começar a partir de $|j j\rangle$, o estado com m_{\max} e construir os outros estados usando o operador de descida J_- :

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

Seja $C_{(j m)}^{(-)} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$ o coeficiente da ação de J_- acima. Construímos uma tabela para $C_{(j m)}^{(-)}$

$C_{jm}^{(-)}$ \ j	m	2	1	0
2	2	2	x	x
1	2	$\sqrt{6}$	$\sqrt{2}$	x
0	2	$\sqrt{6}$	$\sqrt{2}$	0
-1	2	2	0	x
-2	2	0	x	x

$$i) j=2, \quad m = \pm 2, \pm 1, 0$$

Evidentemente

$$|22\rangle = |1\rangle|1\rangle.$$

$$|21\rangle = \frac{J_- |22\rangle}{2} = \frac{1}{2} (\sqrt{2} |0\rangle|1\rangle + \sqrt{2} |1\rangle|0\rangle)$$

$$|21\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle).$$

$$|20\rangle = \frac{J_- |21\rangle}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2} |0\rangle|0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle|\bar{1}\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2} |0\rangle|0\rangle + \sqrt{2} |\bar{1}\rangle|1\rangle) \right\}$$

$$|20\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1\rangle|\bar{1}\rangle + |\bar{1}\rangle|1\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle|0\rangle.$$

$$|2\bar{1}\rangle = \frac{J_- |20\rangle}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2}|0\rangle|\bar{1}\rangle + \sqrt{2}|\bar{1}\rangle|0\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} (\sqrt{2}|\bar{1}\rangle|0\rangle + \sqrt{2}|0\rangle|\bar{1}\rangle) \right\}$$

$$|2\bar{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|\bar{1}\rangle + |\bar{1}\rangle|0\rangle).$$

$$|2\bar{a}\rangle = |\bar{1}\rangle|\bar{1}\rangle.$$

$$ii) j=1, \quad m = \pm 1, 0$$

$|11\rangle$ deve ser ortogonal a $|21\rangle$:

$$|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle).$$

$$|10\rangle = \frac{J_- |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (\cancel{\sqrt{2}|0\rangle|0\rangle} + \cancel{\sqrt{2}|1\rangle|\bar{1}\rangle}) \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\sqrt{2}} (\cancel{\sqrt{2}|0\rangle|0\rangle} + \cancel{\sqrt{2}|\bar{1}\rangle|1\rangle}) \right\}$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle|\bar{1}\rangle - |\bar{1}\rangle|1\rangle).$$

$$|1\bar{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|1\bar{1}\rangle - |1\bar{1}\rangle|0\rangle).$$

iii) $j=0$, $m=0$

$|00\rangle$ tem que ser ortogonal a $|20\rangle$ e $|10\rangle$

Escrevemos: $|00\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|1\bar{1}\rangle + \gamma|1\bar{1}\rangle$

$$\langle 10|00\rangle = 0 = \frac{\beta}{\sqrt{2}} - \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \Rightarrow \gamma = \beta.$$

$$\langle 20|00\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\alpha + 2\frac{\beta}{\sqrt{6}} \Rightarrow \alpha = -\beta$$

Escolhemos;

$$\beta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \alpha = -\frac{1}{\sqrt{3}},$$

obtendo:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\bar{1}\rangle + |1\bar{1}\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}} |0\rangle|0\rangle.$$

$|1\rangle|1\rangle$ $|1\rangle|0\rangle$ $|1\rangle|1\rangle$ $|0\rangle|1\rangle$ $|0\rangle|0\rangle$ $|0\rangle|1\rangle$ $|1\rangle|1\rangle$ $|1\rangle|0\rangle$ $|1\rangle|1\rangle$

$|22\rangle$
 $|21\rangle$
 $|20\rangle$
 $|21\rangle$
 $|22\rangle$
 $|11\rangle$
 $|10\rangle$
 $|11\rangle$
 $|00\rangle$

1

$1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{6}$

$1/\sqrt{2}$

$\sqrt{2/3}$

$1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{6}$

$1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{2}$

$-1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{2}$

$-1/\sqrt{2}$

$1/\sqrt{3}$

$-1/\sqrt{3}$

$1/\sqrt{3}$

$-1/\sqrt{2}$

1

R68



Scattering Theory

Radial Equation
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Boundary condition
$$u(0) = 0$$

Solution for free particle
$$\Psi = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Particle current
$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$$

Bessel function
$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} j_l(x) = \frac{1}{x} \sin(x - l\frac{\pi}{2})$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} j_l(x) = \frac{1}{(2l+1)!} x^{l+1}$$

Free Wave expansion
$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

Partial Wave appr.
$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{kl}(r) = \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$$

Limiting condition
$$\sqrt{l(l+1)} > kr_0$$

where r_0 is the potential effective distance

Scattering Amp.
$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \cdot P_l(\cos \theta)$$

Differential Cross section
$$d\sigma/d\Omega = |f(\theta)|^2$$

Total Cross section
$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Born Approximation
$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r$$

where $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ $|\vec{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$

Central Pot.
$$f(\theta) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^{\infty} r \cdot V(r) \sin(qr) dr$$

condition
$$\frac{m}{k\hbar^2} \left| \int_0^{\infty} V(r) (e^{2ikr} - 1) dr \right| \ll 1$$

Useful Relations

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi) = (-1)^{l+m} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^*$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi + \pi) = (-1)^m Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\langle klm | \frac{1}{r} | klm \rangle = \frac{1}{a_0 n^2} \quad \langle klm | \frac{1}{r^2} | klm \rangle = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}$$

$$\langle klm | \frac{1}{r^3} | klm \rangle = \frac{1}{a_0^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{22} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$$

Time-Independent Perturbation Theory

Perturbation
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad W \ll H_0$$

while
$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^0 |\varphi_n\rangle \quad \hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

First Order
$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle$$

$$|\psi_n\rangle = N \left[|\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} |\varphi_k\rangle \right]$$

Second Order
$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

Degenerate states diagonalize the perturbation in each state's degeneracy subspaces, one by one. If the Operator of the degeneracy commutes with the perturbation than the perturbation is diagonal & Perturbation theory gives exact results.

Time Dependent Perturbation Theory

Transition probability
$$P_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2$$

where $\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar} (E_f - E_i)$ $V_{fi} = \langle \varphi_f | V(\vec{r}, t) | \varphi_i \rangle$

Conditions $|V_{fi}| \ll |E_f - E_i|$ **I-order:** $P_{fi} \ll 1$

Adiabatic Theorem short perturbations are felt like delta functions, while slowly changing perturbation will not follow with transition.

Sinusoidal Perturbation
$$P_{fi} \cong \frac{|V_{fi}|^2 \sin^2 \left(\frac{\omega - |\omega_{fi}|}{2} t \right)}{4\hbar^2 \left(\frac{\omega - |\omega_{fi}|}{2} \right)^2}$$

Conditions $t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|}$ $|V_{fi}| t \ll \hbar$

Fermi's Golden Rule
$$R_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f)$$

where $\rho(E_f)$ is energy density of final state

Atomic Transitions

Electric Dipole
$$V_{DE} = -\frac{e\mathcal{E}}{m\omega} p_z \sin \omega t$$

Magnetic Dipole
$$V_{DM} = -\frac{e\mathcal{E}}{2mc} (L_x + 2S_x) \cos \omega t$$

Electric Quadrupole
$$V_{QE} = -\frac{e\mathcal{E}}{2mc} (yp_z + zp_y) \cos \omega t$$

Selection Rules

The Integral $\int Y_{l_1 m_1}^* Y_{l_2 m_2} Y_{l_3 m_3} d\Omega \neq 0$ only if

- 1) $m_1 = m_2 + m_3$
- 2) triangle can be created from l_1, l_2, l_3
- 3) parity: $l_1 + l_2 - l_3 = \text{even}$

Useful Relations for field polarization calculus

$$x = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} [Y_{11} - Y_{1-1}] r \quad y = -\frac{1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} [Y_{11} + Y_{1-1}] r$$

$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \cdot Y_{10} \quad \vec{p} = \frac{m\mathbf{l}}{\hbar} [H, \vec{r}]$$

Angular Momentum

Rotation Operator $\hat{R}_n(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{L}\cdot\hat{n}\right)$

Orbital Angular Momentum $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$L_x = yp_z - p_yz$ $L_y = zp_x - p_zx$ $L_z = xp_y - p_xy$

$L_x = \frac{\hbar}{i} \left[-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right]$ $L_y = \frac{\hbar}{i} \left[\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right]$

$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$ $L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$

Spin operator $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$

Pauli matrices $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

prop. $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$

$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$

Rotation. prop. $e^{-i\frac{\alpha}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n}} = \cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\sin\frac{\alpha}{2}$

Ladder Operators $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$

$J^2 = J_-J_+ + J_z^2 + \hbar J_z$

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

Commutation relations

$[J_i, J_j] = i\hbar \cdot \varepsilon_{ijk}J_k$ $[\vec{J}, J^2] = 0$

$[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm}$ $[J^2, J_{\pm}] = 0$

Spin addition $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

$J = |j_1 - j_2| \dots (j_1 + j_2)$ $M = m_1 + m_2$

relations $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1\vec{J}_2$

$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$

$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = J_{1z}J_{2z} + \frac{1}{2}(J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+})$

Spin states representation

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

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

$\Psi_{k,l+\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{kl}(r) \begin{cases} \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{cases}$

Spinors

$\Psi_{k,l+\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{kl}(r) \begin{cases} -\sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{cases}$

Hydrogen Atom

Fine structure constant $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$

Bohr radius $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar}{m\alpha}$

Energy levels $E_n = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{1}{n^2}$

Radial Functions $R(r) = N \cdot r^l e^{-\frac{r}{na_0}} P_{n,l}(r)$

$R_{1,0} = 2a_0^{-3/2} e^{-\frac{r}{a_0}}$ $R_{2,0} = 2(2a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$

$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{5}}(2a_0)^{-3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$ $R_{n,n-1} = Cr^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}}$

Interaction Hamiltonians + Corrections

Spin-Orbit Coupling $H_{SO} = \frac{e}{2m^2c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r}$

Hydrogen $H_{SO} = \frac{e^2}{2\mu^2c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} \frac{1}{r^3}$

Correction $\Delta E_{nl} = \frac{1}{4}mc^2\frac{\alpha^4}{n^3} \begin{cases} \frac{1}{j(j+\frac{1}{2})} & j = l + \frac{1}{2} \\ \frac{-1}{(j+\frac{1}{2})(j+1)} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$

Weakly Relativistic correction

$E_K \cong \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$ $H_{mv} = -\frac{1}{2mc^2}(H_0 - V)^2$

Correction $\Delta E_{nl} = \frac{1}{4}mc^2\frac{\alpha^4}{n^3} \left[\frac{3}{2n} - \frac{2}{l+\frac{1}{2}} \right]$

Electromagnetic interaction $H_{EM} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right)^2 + q\varphi$

first order $H_B = -\frac{q\vec{B}}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) = \omega_L(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \hat{B}$

Larmor frequency $\omega_L = -\frac{q\vec{B}}{2mc}$

Correction $\Delta E_l = M_J\omega_L\hbar \left(1 \pm \frac{1}{2l+1}\right)$ $J = l \pm \frac{1}{2}$

for weak fields $H_B \ll H_{SO}$

Identical Particles

Permutation Operator $P_{21}|1\varphi_1; 2\varphi_2\rangle = |1\varphi_2; 2\varphi_1\rangle$

prop. $P_{21}^\dagger = P_{21}$ $P_{21}^2 = 1$ eigenvalues: ± 1

Tensor multiplication $\langle 1a; 2b | 1c; 2d \rangle = \langle 1a | 1c \rangle \langle 2b | 2d \rangle$

Symmetrizer $\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha}$

two particles $\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + P_{21})$ (normalized)

Anti-Symmetrizer

$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}$ $\varepsilon_{\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{even permutation} \\ -1 & \text{odd permutation} \end{cases}$

two particles $\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{21})$ (normalized)

Proprieties $S^\dagger = S^2 = S$ $A^\dagger = A^2 = A$ $AS = SA = 0$

Symmetrization postulate a physical system of identical particles can be either completely symmetric or completely anti-symmetric.

32. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

J	J	\dots
M	M	\dots
m_1	m_2	\dots
m_1	m_2	\dots
\vdots	\vdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots
Coefficients		

$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$

$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$

$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$

$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$

$Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$

$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$

$d_{m,0}^\ell = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m e^{-im\phi}$

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$
 $= (-1)^{J-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 JM \rangle$

$d_{m',m}^j = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^j = d_{-m,-m'}^j$

$d_{0,0}^1 = \cos \theta$

$d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2}$

$d_{1,1}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2}$

$d_{1,0}^1 = -\frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$

$d_{1,-1}^1 = \frac{1 - \cos \theta}{2}$

$d_{3/2,3/2}^{3/2} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,1/2}^{3/2} = -\sqrt{3} \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,-1/2}^{3/2} = \sqrt{3} \frac{1 - \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,-3/2}^{3/2} = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{1/2,1/2}^{3/2} = \frac{3 \cos \theta - 1}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{1/2,-1/2}^{3/2} = -\frac{3 \cos \theta + 1}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{2,2}^2 = \left(\frac{1 + \cos \theta}{2} \right)^2$

$d_{2,1}^2 = -\frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \theta$

$d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$

$d_{2,-1}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \theta$

$d_{2,-2}^2 = \left(\frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^2$

$d_{1,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$

$d_{1,0}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$

$d_{1,-1}^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2} (2 \cos \theta + 1)$

$d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$

Figure 32.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.