ADIÇÃO DE MOMENTOS ANGULARES

O PROBLEMA ESTUDADO NESSE CAPÍTULO TEM O SEGUINTE OBJETIVO. SEJA UM SISTEMA ONDE SE PODEM DEFINIR 2 MOMENTOS ANGULARES. ELES PODEM SER OS MOMENTOS ANGULARES ORBITAIS DE 2 PARTÍCULAS ($\vec{L}_1, \vec{L}_2$), OU OS MOMENTOS ANGULARES ORBITAL E DE SPIN ($\vec{L}, \vec{S}$) DE UMA MESMA PARTÍCULA. FREQUENTEMENTE ACONTECE DE O HAMILTONIANO DO SISTEMA (H) NÃO COMUTAR COM OS MOMENTOS ANGULARES INDIVIDUAIS ($\vec{L}_1$ E $\vec{L}_2$, NUM CASO, E $\vec{L}$ E $\vec{S}$, NO OUTRO), MAS ELE COMUTA COM A SOMA DOS MOMENTOS ANGULARES:

$$[H, \vec{L}_1] \neq 0, \ [H, \vec{L}_2] \neq 0 \quad \text{MAS} \quad [H, \vec{L}_1 + \vec{L}_2] = 0$$

$$[H, \vec{L}] \neq 0, \ [H, \vec{S}] \neq 0 \quad \text{MAS} \quad [H, \vec{L} + \vec{S}] = 0$$

É CLARO QUE O PROBLEMA FICA MAIS SIMPLES NA BASE COMUM DE H E $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ OU $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (NA VERDADE, L^2, L_z OU J^2, J_z).

ESTUDAREMOS COMO CONSTRUIR ESSA BASE DE AUTO-VETORES SIMULTÂNEOS DE (L^2, L_z) OU (J^2, J_z) A PARTIR DA BASE DE $(L_1^2, L_{1z}, L_2^2, L_{2z})$ OU (L^2, L_z, S^2, S_z).

VAMOS SER MAIS CONCRETOS. SEJA UM ÁTOMO DE 2 ELÉTRONS. SEU HAMILTONIANO PODE SER ESCRITO COMO:

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

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 + V(r_1) \; ; \quad H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_2 + V(r_2)$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (Z = \text{CARGA DO NÚCLEO})$$

$$H_{12} = \vartheta(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \qquad \vartheta(r) = \frac{e^2}{r}$$

OS TERMOS H_1 E H_2 DESCREVEM AS ENERGIAS CINÉTICA E POTENCIAL (ATRAÇÃO PELO NÚCLEO) DE CADA ELÉTRON. O TERMO H_{12} É A REPULSÃO COULOMBIANA ENTRE OS ELÉTRONS. JÁ VIMOS QUE:

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

ALÉM DISSO, POR ATUAREM EM COORDENADAS DIFERENTES:

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

PORTANTO, $[H_1 + H_2, \vec{L}_1] = [H_1 + H_2, \vec{L}_2] = 0.$

ENTRETANTO: $[\vec{L}_1, H_{12}] \neq 0$ E $[\vec{L}_2, H_{12}] \neq 0$!
PORÉM, A SOMA $\vec{L}_1 + \vec{L}_2$ COMUTA COM H_{12} (E H)!
DE FATO, TOMEMOS APENAS A COMPONENTE z.

$$[L_z, v(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] = [x_1 p_{1y} - y_1 p_{1x} + x_2 p_{2y} - y_2 p_{2x}, v(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x_1 \frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial v}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial v}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial v}{\partial x_2} \right) = (*)$$

MAS:

$$\frac{\partial v}{\partial x_1} = v' \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_1} = v' \frac{(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\frac{\partial v}{\partial x_2} = v' \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_2} = -v' \frac{(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \ldots$$

ASSIM:

$$(*) = \frac{\hbar}{i} \frac{v'}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Big[x_1 (y_1 - y_2) - y_1 (x_1 - x_2) + x_2 (y_2 - y_1) - y_2 (x_2 - x_1) \Big] = 0$$

PODE-SE MOSTRAR DE MANEIRA ANÁLOGA (OU POR SIMETRIA ESFÉRICA) QUE:

$$[L_x, H_{12}] = [L_y, H_{12}] = 0$$

LOGO: $[\vec{L}, H] = 0$

ALGO ANÁLOGO OCORRE COM $\vec{L}$ E $\vec{S}$ NO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO (COM APENAS UM ELÉTRON). JÁ VIMOS QUE PARA:

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

MESMO APÓS INCORPORAR O SPIN DO ELÉTRON,

$$[H, \vec{S}] = 0$$

POIS OS OPERADORES DE SPIN COMUTAM COM QUALQUER OPERADOR ORBITAL. VEREMOS MAIS ADIANTE QUE CORREÇÕES RELATIVÍSTICAS A H INTRODUZEM UM NOVO TERMO:

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

ONDE $\xi(r)$ É UMA FUNÇÃO DE r APENAS.

ESSE TERMO É CONHECIDO COMO INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA. $\vec{L}$ E $\vec{S}$ NÃO COMUTAM COM H_{SO}, MAS A SOMA:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

COMUTA. DE FATO:

$$[L_z, H_{so}] = \xi(r)\,[L_z, \vec{L}\cdot\vec{S}]$$ (JÁ QUE L_z SÓ ATUA NOS ÂNGULOS)

$$= \xi(r)\,[L_z, L_x S_x + L_y S_y]$$

$$= \xi(r)(i\hbar)\,[L_y S_x - L_x S_y]$$

$$[S_z, H_{so}] = \xi(r)\,[S_z, L_x S_x + L_y S_y]$$

$$= \xi(r)(i\hbar)\,[L_x S_y - L_y S_x]$$

SEGUE QUE: $[L_z + S_z, H_{so}] = [J_z, H_{so}] = 0$

E, ANALOGAMENTE,

$$[J_y, H_{so}] = [J_x, H_{so}] = 0 \Rightarrow [\vec{J}, H] = 0.$$

O PROBLEMA

NOS DOIS CASOS ACIMA, TEMOS 2 MOMENTOS ANGULARES, QUE CHAMAREMOS $\vec{J}_1, \vec{J}_2$, QUE COMUTAM ENTRE SI E, PORTANTO, PODEMOS ESCREVER AUTO-VETORES SIMULTÂNEOS DE $\{J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}\}$

$$|j_1\, j_2\, m_1\, m_2\rangle$$

TAL QUE:

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

MAS, DADO $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ TEMOS:

$$[\vec{J}_1, J_1^2] = [\vec{J}_1, J_2^2] = [\vec{J}_2, J_2^2] = [\vec{J}_2, J_1^2] = 0$$

$$\Rightarrow [J_1^2, \underbrace{\vec{J}_1 + \vec{J}_2}_{\vec{J}}] = 0 \quad \text{E} \quad [J_2^2, \underbrace{\vec{J}_1 + \vec{J}_2}_{\vec{J}}] = 0$$

SEGUE QUE:
$$[J_1^2, J^2] = [J_2^2, J^2] = 0$$
$$[J_1^2, J_z] = [J_2^2, J_z] = 0$$

FINALMENTE $\vec{J}$ É MOMENTO ANGULAR TAMBÉM, E SATISFAZ:

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

PORTANTO, OS SEGUINTES OPERADORES COMUTAM ENTRE SI: $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$ E PODEMOS ACHAR UMA BASE SIMULTÂNEA DE AUTO-VETORES TAL QUE:

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

O PROBLEMA CONSISTE EM, DADA A BASE $|j_1\, j_2\, m_1\, m_2\rangle$, ENCONTRAR:

(i) QUAIS OS VALORES DE j POSSÍVEIS E QUANTAS VEZES CADA UM APARECE?
(OBVIAMENTE, PARA CADA j, $m = -j, \dots, +j$)

(ii) ACHAR OS ESTADOS $|j_1, j_2, j, m\rangle$ EM TERMOS DOS ESTADOS $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$

UM EXEMPLO: $j_1 = j_2 = 1/2$

A BASE INICIAL É: $|1/2, 1/2, m_1, m_2\rangle$ COM $m_1 = \pm\frac{1}{2}$ E $m_2 = \pm\frac{1}{2}$, OU, NA NOTAÇÃO SIMPLIFICADA DO CAPÍTULO 3:

$$|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \rightarrow \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$$

CLARO QUE: $J_1^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

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

NÃO IMPORTA OS VALORES DE $\varepsilon_1, \varepsilon_2$.

A BASE DE AUTO-VETORES DE $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$ É:

$$|1/2, 1/2, j, m\rangle \longrightarrow |j\, m\rangle$$

VAMOS ANALISAR A AÇÃO DE $J_z = J_{1z} + J_{2z}$.

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

MATRICIALMENTE:

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

OLHANDO APENAS PARA $|++\rangle$:

$$J_z |++\rangle = \hbar |++\rangle$$

ASSIM, $|++\rangle$ É AUTO-VETOR DE J_z COM AUTO-VALOR $\hbar$, OU $M=+1$. COMO ESSE É O <u>MAIOR</u> VALOR POSSÍVEL DE <u>M</u>, SEGUE ESSE <u>TEM</u> QUE SER DO TIPO:

$$|\alpha, j=1, m=1\rangle = |++\rangle$$

POIS, SE FOSSE UM VALOR DE $j>1$, HAVERIA NECESSARIAMENTE $m>1$, O QUE NÃO É O CASO. NOTEM QUE UM ÍNDICE α FOI ACRESCIDO, PORQUE PODE HAVER MAIS DE UM ESTADO DO TIPO $|j=1, m=1\rangle$. MAS COMO NÃO EXISTE OUTRO ESTADO COM $m=1$, PODEMOS IGNORAR O α E:

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

RACIOCÍNIO ANÁLOGO É USADO PARA MOSTRAR

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

EVIDENTEMENTE, TEM QUE HAVER UM ESTADO $|j=1, m=0\rangle$, QUE É COMBINAÇÃO LINEAR DE $|+-\rangle$ E $|-+\rangle$, DE TAL FORMA QUE: $m = m_1 + m_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ OU $-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}$.

É FÁCIL ACHAR QUAL É A COMBINAÇÃO LINEAR CORRETA, USANDO $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ APLICADO A $|++\rangle$. DE FATO:

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

POR OUTRO LADO:

$$J_-|j=1, m=1\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|j=1, m=0\rangle$$

ONDE USAMOS: $J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,|j, m-1\rangle$
IGUALANDO AS AÇÕES NAS 2 BASES:

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

JÁ NORMALIZADO. O MESMO ESTADO PODERIA TER SIDO OBTIDO ATUANDO COM J_+ EM

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

ASSIM TEMOS:

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

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

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

O ÚNICO ESTADO NORMAL AOS 3 ESTADOS ACIMA É:

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

É FÁCIL DE PROVAR QUE ELE É UM ESTADO DO TIPO $|j=0, m=0\rangle$. POR EXEMPLO,

$$J_z \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle - |-+\rangle\right] = (J_{1z} + J_{2z})\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle - |-+\rangle\right]$$

$$= 0 \Rightarrow m = 0$$

COMO ELE É O ÚNICO ESTADO QUE SOBROU, ELE SÓ PODE CORRESPONDER A $j=0$, SENÃO HAVERIA MAIS ESTADOS.
PORTANTO: $|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle - |-+\rangle\right]$

LOGO, DEDUZIMOS QUE, PARA $j_1 = j_2 = 1/2$

$$\Rightarrow \quad j = 0 \quad \text{OU} \quad j = 1$$

CADA UM APARECENDO UMA ÚNICA VEZ E:

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

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

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

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

OS MESMOS RESULTADOS PODERIAM SER OBTIDOS DA DIAGONALIZAÇÃO DA MATRIZ DE J^2 (VER LIVRO):

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

NOSSA PRÓXIMA TAREFA É GENERALIZAR ESSES RESULTADOS PARA j_1, j_2 QUAISQUER.