Adição de Momento Angular - Introdução

Revisão da Mecânica Clássica - um bom começo

- Considere N partículas clássicas. O momento angular total $\mathcal{L}$ deste sistema com respeito à um ponto fixo O é o vetor soma dos momentos angulares individuais das N partículas com respeito ao ponto O.

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}_i \Longrightarrow \mathcal{L}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i, \text{ onde } \begin{cases} \mathbf{r}_i \text{ vetor, cujo módulo é a distância} \\ \quad \text{entre } O \text{ e a partícula } i, \text{ direção } O\text{–}i. \\ \mathbf{p}_i \text{ é o momento linear da partícula.} \end{cases}$$

- Como seria o torque total (soma dos momentos das forças atuando no sistema), em relação ao ponto O? Esse torque, $\mathcal{T}$, é definido por

$$\mathcal{T} = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{T}_i \Longrightarrow \mathcal{T}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i \text{ onde } \begin{cases} \mathbf{r}_i \text{ vetor, cujo módulo é a distância} \\ \quad \text{entre } O \text{ e a partícula } i \text{ (ponto de} \\ \quad \text{aplicação da força } F_i), \text{ direção } O\text{–}i. \\ \mathbf{F}_i \text{ é a força atuando na partícula.} \end{cases}$$

$$\mathcal{L} \text{ é constante, se } \mathcal{T} = \frac{d\mathcal{L}}{dt} = 0 \begin{cases} \text{se as forças externas forem zero} \\ \text{(sistema isolado).} \\ \\ \text{se todas as forças externas} \\ \text{apontam para um centro.} \end{cases}$$

Adição de Momento Angular – caso de duas partículas clássicas

- Considere 2 partículas clássicas, (1) e (2), sujeitas à mesma força central (que pode ser criada por uma terceira partícula suficientemente "pesada", para permanecer sem movimento na origem).
- Se as duas partículas não exercem forças uma na outra, seus momentos angulares $\mathcal{L}_1$ e $\mathcal{L}_2$, com respeito ao centro de força O, são ambos constantes de movimento. A única força atuando sobre a partícula (1), por exemplo, é direcionada à O; seu momento com respeito à esse ponto, é, portanto, zero, assim como $\frac{d\mathcal{L}_1}{dt}$. $\mathcal{L}_1$ é, portanto, uma constante de movimento ($\mathcal{L}_2$ também).
- Se as duas partículas exercem forças uma na outra, a força da (2) sobre a (1), por exemplo, pode gerar um torque diferente de zero com respeito ao ponto O. Consequentemente $\mathcal{L}_1$ não é uma constante de movimento. Entretanto se a interação entre as partículas respeitam o princípio de ação e reação, o momento da força de (1) sobre a (2), compensa o da (2) sobre a (1) e a soma dos momentos, devido à essas forças internas, se anula: o momento angular total se conserva ao longo do tempo (constante de movimento).
- Desta forma, em um sistema de partículas interagentes os momentos angulares internos podem ser transferidos de uma partícula para a outra, mas o momento angular total pode ser uma constante movimento.

Adição de Momento Angular – caso de duas partículas quânticas

- Considere, agora na Mecânica Quântica, o exemplo anterior de um sistema de duas partículas. No caso das partículas não interagirem (representação $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$), podemos escrever $H = H_1 + H_2 \begin{cases} H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta_1 + V(r_1) \\ H_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta_2 + V(r_2) \end{cases}$

  Note que $V(\mathbf{r}) = V(r)$ (central). Nesta condição (No capítulo 7 de F689), sabemos que $\begin{cases} [\mathbf{L}_1, H_1] = 0, \\ [\mathbf{L}_2, H_2] = 0. \end{cases}$

  Sabemos também (capítulo 2 de F689) que observáveis de partículas diferentes comutam $\begin{cases} [\mathbf{L}_1, H_2] = 0, \\ [\mathbf{L}_2, H_1] = 0. \end{cases}$

  Isso permite concluir que $\mathbf{L}_1$ e $\mathbf{L}_2$ são constantes de movimento.

- Suponha que elas interajam com um potencial do tipo $v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, que depende apenas da distância entre elas $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$.

  A nova Hamiltoniana é: $H = H_1 + H_2 + v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, onde $\begin{cases} [\mathbf{L}_1, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)] \\ [\mathbf{L}_2, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)] \end{cases}$

  precisam ser calculados. Vamos fazer isso em coordenadas cartesianas.

Adição de Momento Angular – caso de duas partículas quânticas

- Por exemplo, comece por

$[L_{1z}, H] = [L_{1z}, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|] = \frac{\hbar}{i}[x_1\frac{\partial}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial}{\partial x_1}, v]$ que quando aplicada à

$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, fica:

$\frac{\hbar}{i}\{(x_1\frac{\partial}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial}{\partial x_1})(v\psi) - v(x_1\frac{\partial}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial}{\partial x_1})\psi\} = \frac{\hbar}{i}(x_1\frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial v}{\partial x_1})\psi$

quantidade que não é zero. Se tivéssemos feito com L_{2z}, obteríamos

$$[L_{2z}, H]\psi = \frac{\hbar}{i}(x_2\frac{\partial v}{\partial y_2} - y_2\frac{\partial v}{\partial x_2}).$$

- Para $L_z = L_{1z} + L_{2z}$, basta combinar os dois resultados:

$$[L_{1z} + L_{2z}, H]\psi = \frac{\hbar}{i}(x_1\frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial v}{\partial x_1} + x_2\frac{\partial v}{\partial y_2} - y_2\frac{\partial v}{\partial x_2})\psi$$

- Note, no entanto, que $\frac{\partial v}{\partial x_1} = \frac{\partial v}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_1} = v'\frac{\partial\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}{\partial x_1}$

ou seja $\frac{\partial v}{\partial x_1} = v'\frac{(x_1 - x_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$. De forma similar, obteríamos $\frac{\partial v}{\partial x_2} = v'\frac{(x_2 - x_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ e

para as coordenadas y, $\frac{\partial v}{\partial y_1} = v'\frac{(y_1 - y_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$; $\frac{\partial v}{\partial y_2} = v'\frac{(y_2 - y_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$

- Juntando tudo, concluímos $[L_z, H] = [L_{1z} + L_{2z}, H] = 0 \to L_z$ é uma constante de movimento, como na física clássica.

Adição de Momento Angular – caso de uma partícula com spin

- Até agora, consideramos que as partículas não tinham spin. Suponha agora uma única partícula com momento angular orbital e spin. Suponha que ela esteja sujeita à um potencial central $V(r)$. Nestas condições os operadores de spin comutariam com a Hamiltoniana do sistema $H = \dfrac{P^2}{2\mu} + V(R)$ e a presença do spin apenas aumentaria a degenerescência do sistema, pois a partícula com spin para cima e para baixo tem o mesmo espectro. Isso fica mais interessante quando agregamos uma correção relativística que diz que o momento magnético orbital interage com o momento magnético de spin via um termo do tipo (será estudado mais tarde): $H_{\text{SO}} = \xi(r)\mathbf{L}.\mathbf{S}$

- Analogamente, é possível verificar que $\begin{cases}[L_z, H_{\text{SO}}] \neq 0 \\ [S_z, H_{\text{SO}}] \neq 0\end{cases}$ mas $[S_z + L_z, H_{\text{SO}}] = 0$

Para tanto basta calcular $\begin{cases}[L_z, H_{\text{SO}}] = \xi(r)[L_z, L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z] \\ \\ [S_z, H_{\text{SO}}] = \xi(r)[S_z, L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z]\end{cases}$ direto,

Aqui **J** pode ser **L** ou **S**

pois sabemos que $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ $\begin{cases}[L_z, H_{\text{SO}}] = i\hbar\xi(r)(L_yS_x - L_xS_y) \\ [S_z, H_{\text{SO}}] = i\hbar\xi(r)(L_xS_y - L_yS_x)\end{cases}$

e portanto, para $H_{\text{SO}} = \xi(r)\mathbf{L}.\mathbf{S}$ e $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \Rightarrow [J_z, H_{\text{SO}}] = 0$

Adição de Momento Angular – caso geral

- Nos dois exemplos $\begin{cases} a)\ \mathbf{J}=\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2 \\ b)\ \mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S} \end{cases}$ $\rightarrow$ generalizados para $\mathbf{J}=\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$,

  vimos que $\begin{cases} [\mathbf{J}_1, H]\neq 0 \\ [\mathbf{J}_2, H]\neq 0 \end{cases}$ mas $[\mathbf{J}, H]=[\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2, H]=0$ onde $H=H_0+\begin{cases} v(R) \\ V_{\text{SO}} \end{cases}$

- Para o pedaço H_0 de H $\begin{cases} \text{caso 1 } (v(R)) \rightarrow H_0=\frac{\mathbf{P}_1^2}{2\mu_1}+\frac{\mathbf{P}_2^2}{2\mu_2}+V(R_1)+V(R_2) \\ \text{e} \\ \text{caso 2 } (V_{\text{SO}}) \rightarrow H_0=\frac{\mathbf{P}^2}{2\mu}+V(R) \end{cases}$

  as bases naturais seriam de autokets de $\begin{cases} \{H_0, \mathbf{L}_1^2, \mathbf{L}_2^2, L_{1z}, L_{2z}\} \\ \\ \{H_0, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, L_z, S_z\} \end{cases}$ que podem ser generalizadas para $\{H_0, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ (simples "junção de espaços").

- Para H a base natural é de autokets de $\{H, \mathbf{J}^2, J_z\}$, com $\begin{cases} \mathbf{J}=\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2 \\ \text{ou} \\ \mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S} \end{cases}$

  É tentador colocar nessa base $\mathbf{J}_1^2$ e $\mathbf{J}_2^2$, mas para isso, teria que convencê-lo que vale $\begin{cases} [\mathbf{J}_1^2, H]=[\mathbf{J}_1^2, J^2]=[\mathbf{J}_1^2, J_z]=0 \\ [\mathbf{J}_2^2, H]=[\mathbf{J}_2^2, J^2]=[\mathbf{J}_2^2, J_z]=0 \end{cases}$ $\begin{cases} \text{para os casos acima, isso é verdade} \\ \text{apenas para } V_{SO}. \end{cases}$

Adição de Momento Angular – caso geral

- Verificaremos, caso a caso, os valores de $\begin{cases}[\mathbf{J}_1^2,H];[\mathbf{J}_1^2,\mathbf{J}^2];[\mathbf{J}_1^2,J_z];\\ [\mathbf{J}_2^2,H];[\mathbf{J}_2^2,\mathbf{J}^2];[\mathbf{J}_2^2,J_z].\end{cases}$

  Comecemos com os comutadores que envolvem apenas momento angular, como por exemplo, $[\mathbf{J}_1^2,\mathbf{J}^2]=[\mathbf{J}_1^2,(\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2)^2]=[\mathbf{J}_1^2,\mathbf{J}_1^2+\mathbf{J}_2^2+\mathbf{J}_1.\mathbf{J}_2+\mathbf{J}_1.\mathbf{J}_2]=0,$ pois $\mathbf{J}_1^2$ comuta consigo mesmo, com qualquer de suas projeções ($\mathbf{J}_1.\mathbf{J}_2$ é uma de suas projeções) e comuta com qualquer observável do tipo 2. Por razões semelhantes $[\mathbf{J}_1^2,J_z]=[\mathbf{J}_2^2,\mathbf{J}^2]=[\mathbf{J}_2^2,J_z]=0.$

  Como $\begin{cases}[\mathbf{J}_1^2,H_0]=0\\ \\ [\mathbf{J}_2^2,H_0]=0\end{cases}$ falta mostrar que $\begin{cases}\text{caso 1: } [\mathbf{L}_1^2,v(R)]=[\mathbf{L}_2^2,v(R)]=?\\ \\ \text{caso 2: } [\mathbf{L}^2,V_{SO}]=[\mathbf{S}^2,V_{SO}]=0\end{cases}$

  O caso 1 segue a lógica do slide 4, exceto que não há razão para cancelamento das contribuições.

  O caso 2 é simples, pois $V_{SO}=\xi(r)\mathbf{L}.\mathbf{S},$ pode ser entendido como uma projeção de $\begin{cases}\mathbf{L}\text{ (todas comutam com }\mathbf{L}^2\text{) para concluir que }[\mathbf{L}^2,V_{SO}]=0\\ \qquad\text{ou}\\ \mathbf{S}\text{ (todas comutam com }\mathbf{S}^2\text{) para concluir que }[\mathbf{S}^2,V_{SO}]=0\end{cases}$

- Entretanto, se retirarmos H podemos incluí-los: $\{\mathbf{J}_1^2,\mathbf{J}_2^2,\mathbf{J}^2,J_z\}$ e buscar uma relação desta base com a de autokets de $\{\mathbf{J}_1^2,\mathbf{J}_2^2,J_{1z},J_{2z}\}$.

Adição de Momento Angular: bases interessantes

- Em seguida, estudaremos a relação entre as bases do slide anterior, envolvendo apenas momento angular, isto é, de autokets de $\begin{cases} \{\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\} \rightarrow \text{base } 1 \\ \quad\quad \text{e} \\ \{\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z\} \quad \rightarrow \text{base } 2 \end{cases}$

- Começaremos por um método relativamente elementar de duas partículas com spins 1/2. Para simplificar consideraremos que apenas os graus de liberdade de spin são importantes. Chamaremos eles de $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$, os operadores de spin das duas partículas.

- A base 1, de autokets de $\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, S_{1z}$ e S_{2z}, é naturalmente criada pelo produto tensorial $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = |\epsilon_1\rangle \otimes |\epsilon_2\rangle = |\pm\rangle \otimes |\pm\rangle$, ou seja, $\{|+,+\rangle, |+,-\rangle, |-,+\rangle, |-,-\rangle\}$.

  Nesta base $\begin{cases} \mathbf{S}_1^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \\ \mathbf{S}_2^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \\ S_{1z}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_1\frac{1}{2}\hbar|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \\ S_{2z}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_2\frac{1}{2}\hbar|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \end{cases}$ $\Rightarrow$ representações matriciais diagonais.

  $\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, S_{1z}$ e S_{2z} constituem um C.C.O.C. (as primeiras duas observáveis são, de fato, múltiplas do operador unidade e o conjunto se mantém completo, mesmo que elas sejam omitidas.

Adição de Momento Angular: bases interessantes

- Para escrever a base 2, precisamos definir $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ e obter (aprendemos na disciplina de F689) que se somarmos momentos angulares, obteremos momento angular, ou seja, um operador vetorial, cujas componentes comutam como momento angular. Isso pode ser obtido de forma direta: $[S_x, S_y] = [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] = [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z}$ ou seja, $[S_x, S_y] = i\hbar S_z,$ conforme esperado entre componentes cartesianas de momento angular.
- O operador $\mathbf{S}^2$ pode ser obtido por $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2).(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) = \mathbf{S_1}^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2$, onde $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ comutam. O produto escalar $\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2$ pode ser expressado em termos dos operadores $S_{1\pm}, S_{1z}, S_{2\pm},$ e S_{2z}. Mostre que

$$\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} = \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}$$

Mostre também que $\begin{cases} [S_z, \mathbf{S}_1^2] = [S_z, \mathbf{S}_2^2] = 0 \\ [\mathbf{S}^2, \mathbf{S}_1^2] = [\mathbf{S}^2, \mathbf{S}_2^2] = 0 \\ [S_z, S_{1z}] = [S_z, S_{2z}] = 0 \end{cases}$

Note, entretanto que $[\mathbf{S}^2, S_{1z}] = [\mathbf{S_1}^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2, S_{1z}] = 2[\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2, S_{1z}],$ ou seja $[\mathbf{S}^2, S_{1z}] = 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}, S_{1z}] = 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y})$. Similarmente $[\mathbf{S}^2, S_{2z}] = 2i\hbar(-S_{2y}S_{1x} + S_{2x}S_{1y})$ e $\therefore [\mathbf{S}^2, S_z] = 0$.

Adição de Momento Angular: relação entre bases

- A base 2, de autokets de $\{\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, \mathbf{S}^2, S_z\}$.Veremos mais tarde que estas observáveis também formam um C.C.O.C. Sabemos que a base 2 será certamente diferente da base 1, de autokets de $\{\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$. Isso porque $\begin{cases} [\mathbf{S}^2, S_{1z}] = 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y}) \neq 0 \\ [\mathbf{S}^2, S_{2z}] = 2i\hbar(-S_{2y}S_{1x} + S_{2x}S_{1y}) \neq 0 \end{cases}$

  Chamaremos os kets autokets de $\{\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, \mathbf{S}^2, S_z\}$ de $|S, M\rangle$. Esse kets respeitam as equações $\begin{cases} \mathbf{S}_1^2|S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S, M\rangle \\ \mathbf{S}_2^2|S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S, M\rangle \\ \mathbf{S}^2|S, M\rangle = S(S+1)\hbar^2|S, M\rangle \\ S_z|S, M\rangle = M\hbar|S, M\rangle \end{cases}$

- Sabemos que $\mathbf{S}$ é momento angular. Portanto S, é inteiro ou semi-inteiro positivo e M satisfaz $-S \leq M \leq +S$, pulando de 1 em 1.
- Nosso problema é descobrir quais são os valores possíveis para S, supondo $S_1 = S_2 = 1/2$ e expressar os kets da base $|S, M\rangle$ em termos dos kets da base 1.
- Vamos fazer isso, de forma relativamente simples, escrevendo $\mathbf{S}^2$ e S_z na base 1 e diagonalizando matrizes (quase diagonais) 4×4.

Relação entre bases: caso de duas partículas de spin ½

- Para obter a relação entre as bases de $\{\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ e $\{\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, \mathbf{S}^2, S_z\}$, dadas por:

$$\text{Base 1}\begin{cases} \mathbf{S}_1^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle \\ \mathbf{S}_2^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle \\ S_{1z}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \epsilon_1\frac{1}{2}\hbar|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle \\ S_{2z}|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \epsilon_2\frac{1}{2}\hbar|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle \end{cases} \quad \text{e} \quad \text{Base 2}\begin{cases} \mathbf{S}_1^2|S,M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S,M\rangle \\ \mathbf{S}_2^2|S,M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S,M\rangle \\ \mathbf{S}^2|S,M\rangle = S(S+1)\hbar^2|S,M\rangle \\ S_z|S,M\rangle = M\hbar|S,M\rangle \end{cases}$$

é importante perceber que S_z comuta com todas os operadores que definem a base 1. Isso implica que S_z é diagonal nas duas bases. O cálculo é direto:

$$S_z|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = (S_{1z}+S_{2z})|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle = \frac{1}{2}(\epsilon_1+\epsilon_2)\hbar|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle$$

Portanto, $|\epsilon_1,\epsilon_2\rangle$ é autoestado de S_z com autovalor $M\hbar$, e $M = \frac{1}{2}(\epsilon_1+\epsilon_2)$.

- Quais são os autovalores possíveis de M, considerando que $\epsilon_1 = \pm 1$ e $\epsilon_2 = \pm 1$?

Aplicação direta da fórmula acima, fornece $M = 1, 0, -1$ $\begin{cases} +1 \to |+,+\rangle \\ -1 \to |-,-\rangle \\ 0 \to \begin{cases} |+,-\rangle \\ |-,+\rangle \end{cases} \end{cases}$

Os autovalores ± 1 não são degenerados e o 0 é bi-degenerado ($\therefore, \forall$ combinação de $|+,-\rangle$ e $|-,+\rangle$ é autoket de S_z com autovalor $0\hbar$).

Relação entre bases: caso de duas partículas de spin ½

- Representação matricial de S_z na base 1:

$$S_z \doteq \begin{array}{c} \\ \langle + + | \\ \langle + - | \\ \langle - + | \\ \langle - - | \end{array} \begin{array}{c} |++\rangle|+-\rangle|-+\rangle|--\rangle \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}$$

- Diagonalização de $\mathbf{S}^2$ na base 1, $\{|\epsilon_1\rangle, \epsilon_2\rangle\}$.

Por que sabemos que $\mathbf{S}^2$ não é diagonal na base 1? Porque $\begin{cases} [\mathbf{S}^2, S_{1z}] \neq 0 \\ [\mathbf{S}^2, S_{2z}] \neq 0 \end{cases}$

- Como calcular elementos de matriz envolvendo $\mathbf{S}^2$? Use (slide 9) que:

1) $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2).(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) = \mathbf{S_1}^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2,$

2) $\mathbf{S}_1.\mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} = \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}$

para obter: $\mathbf{S}^2 = \mathbf{S_1}^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$. Aplique (verifique):

$$\mathbf{S}^2|++\rangle = (\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2)|++\rangle) + \frac{1}{2}\hbar^2)|++\rangle = 2\hbar^2|++\rangle$$

$$\mathbf{S}^2|+-\rangle = (\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2)|+-\rangle) - \frac{1}{2}\hbar^2)|+-\rangle - \hbar^2)|-+\rangle = \hbar^2(|+-\rangle + |-+\rangle$$

$$\mathbf{S}^2|-+\rangle = \hbar^2(|-+\rangle + |+-\rangle; \qquad \mathbf{S}^2|--\rangle = 2\hbar^2|--\rangle$$

Relação entre bases: caso de duas partículas de spin ½

- Representação matricial de $\mathbf{S}^2$ na base $1(\{|\epsilon_1\rangle, \epsilon_2\rangle\})$:

$$\mathbf{S}^2 \doteq \begin{array}{c} \\ \langle ++| \\ \langle +-| \\ \langle -+| \\ \langle --| \end{array} \hbar^2 \begin{array}{c} |{+}{+}\rangle\,|{+}{-}\rangle\,|{-}{+}\rangle\,|{-}{-}\rangle \\ \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{array} \Rightarrow \text{ uma matriz bloco-diagonal.}$$

- Basta diagonalizar o bloco 2×2 (faça em casa!)

$$(\mathbf{S}^2)_0 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \to \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \text{ para o autovalor } 2\hbar^2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \text{ para o autovalor } 0\hbar^2 \end{cases}$$

- Aprendemos, portanto, que $\mathbf{S}^2$ possui dois autovalores distintos, $0\hbar^2$ e $2\hbar^2$. O primeiro é não-degenerado e o segundo é 3-degenerado $\begin{cases} |++\rangle \\ |--\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \end{cases}$

E com isso, obtemos $\begin{cases} |1,+1\rangle = |++\rangle \\ |1,-1\rangle = |--\rangle \\ |1,\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |0,\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \end{cases}$

Caso de duas partículas de spin ½: comentários

- Para o sistema de duas partículas com spin 1/2, a base 1 (dada pelos kets $\{|\epsilon_1\rangle, \epsilon_2\rangle\}$, autokets de $\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}$) forma um conjunto completo, isto é descreve qualquer ket e qualquer operador relacionados à parte de spin do sistema. A base 2 (dada pelos kets $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\}$ autokets de $\mathbf{S}_1^2$, $\mathbf{S}_2^2, \mathbf{S}^2, S_z$) também forma um conjunto completo neste espaço. Note que o espaço foi definido pela nossa escolha $S_1 = S_2 = 1/2$.
- Reconhecemos que $\{|S, M\rangle\}$, com $S = 0$ e 1 e todos os valores de M possíveis para esses valores de S, é uma base completa, pois ela é feita de quatro kets ortogonais que descrevem todos os vetores da base (completa e de mesma dimensão) $\{|\epsilon_1\rangle, \epsilon_2\rangle\}$,

$$\text{isto é} \begin{cases} |1,+1\rangle = |++\rangle \\ |1,-1\rangle = |--\rangle \\ |1,\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |0,\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} |++\rangle = |1,+1\rangle \\ |--\rangle = |1,-1\rangle \\ |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle) \\ |-+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle - |0,0\rangle) \end{cases}$$

- A família de kets $\{|1, M\rangle\}$ com, $M = -1, 0, 1$ constituem os chamados estados tripletos e $|0,0\rangle$ é conhecido por singleto. O tripleto é simétrico na troca de partículas e o singleto é anti-simétrico na troca de partículas.

Isso será importante quando estudarmos partículas idênticas.