
FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE MECÂNICA QUÂNTICA

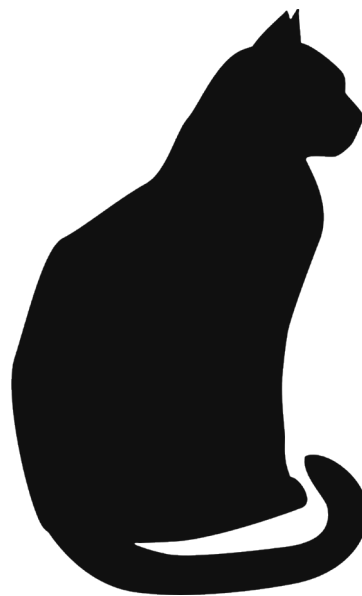
L. R. XIMENES

F. GIMENEZ S.

I I

REVISÃO POR:

A. A. SUAIDE



Prefácio (Em andamento)

Essas “*notas de aula*” se iniciaram durante o curso de Mecânica Quântica I ministrado pelo professor doutor Alexandre A. do Passo Suaide no segundo semestre de 2022 no Instituto de Física da USP (IFUSP). Inicialmente essas notas foram imaginadas para ajudar os alunos que acompanhavam o curso juntamente comigo, de tal forma que conforme as aulas eram ministradas, as notas eram escritas e postadas em um drive separado livre para qualquer um com link, no entanto, após o final do segundo semestre, convidei meu amigo Felps (Felipe G.) para me ajudar a melhorar as notas e acrescentar mais conteúdos de suma importância em mecânica quântica, tornando-se portanto um coautor do texto.

Em alguns meses o assunto do texto veio à tona em um grupo de whatsapp no qual o professor Alexandre A. Suaide fazia parte e comandava, neste contexto ele entrou em contato comigo para propor uma ótima oportunidade tanto para mim, quanto para o Felps: tornar as notas de aula um livro de mecânica quântica focado para estudantes de graduação baseado nas notas de aula escritas por ele e seríamos os autores deste livro. Não pensamos duas vezes e aceitamos a oportunidade grandiosa que nos foi proporcionada. Em seguida buscamos por agências de fomento, como o CNPq, para tentarmos adquirir uma pequena bolsa para cada um, de modo que tivéssemos algum retorno e mantivéssemos a responsabilidade de continuar o texto.

As primeiras partes desse texto consistem dos fundamentos básicos de toda teoria, desde as definições básicas e usos de operadores até as descrições de como o tempo age na mecânica quântica. As demais partes são aplicações destes conceitos básicos e principalmente uma abordagem bastante aprofundada sobre teoria de perturbações.

Os conceitos básicos apresentados no início do texto são de extrema importância de se entender, pois quando chegarmos em teoria de perturbações usaremos basicamente toda parte desses conceitos iniciais.

Acredito que teoria de perturbações aplicadas em mecânica quântica é o foco principal deste texto, pois muitas consequências importantes ocorrem a partir desta, ou seja, o foco dessas notas é apresentar, da forma mais acessível possível, como funciona a teoria, como podemos aplicá-la e por fim nos fenômenos que podemos estudar com ela.

– Lucas R. Ximenes dos Santos

Notações

- Vetores são escritos em **negrito**;
- Versores são todos denotados por \mathbf{e}_i , onde i remete a qual vetor de base está querendo-se referenciar;
- Todos os produtos internos que não estejam na notação “*bra-ket*” são escritos como $\langle \cdot, \cdot \rangle$, onde cada \cdot corresponde à posição de um vetor qualquer;
- Todos os operadores são escritos com $\hat{\cdot}$, por exemplo \hat{a} ;
- A matriz identidade é escrita por $\mathbb{1}$;
- Quando quisermos escrever uma probabilidade, utilizaremos $\mathbb{P}(x)$;
- O conjunto dos números naturais é tomado como sendo $\mathbb{N} \equiv \{1, 2, 3, \dots\}$ (não incluindo o zero);
- Produtos vetoriais e cartesianos são escritos com \times ;
- Produtos tensoriais são escritos com \otimes ;
- Um vetor em coordenadas cilíndricas é escrito como sendo $\mathbf{r}_c = (\rho, \phi, z)$;
- Um vetor em coordenadas esféricas é escrito como sendo $\mathbf{r}_e = (\rho, \theta, \phi)$;
- Argumentos relacionados a parte radial ρ de alguma equação que não seja ela mesma, por exemplo $\alpha\rho$, denotaremos-as por \mathbf{r} ;
- O símbolo \equiv denota equivalência;
- O símbolo $:=$ denota uma definição;

Sumário

Prefácio	2
Notações	4
1 Soma de momento angular	7
1.1 Momento angular em espaço de rotações abstratos	7
1.2 Comutadores do operador soma de momento angular	13
1.3 Coeficientes de Clebsch-Gordan	17
1.3.1 Aplicação no átomo de Hidrogênio	25
Bibliografia	27

1 | Soma de momento angular

Anteriormente, de modo a descrevermos o operador de momento angular quanticamente, partimos da definição clássica desta grandeza $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, substituindo a posição e momento linear por seus respectivos operadores, como por exemplo para a componente z :

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

Podendo assim usar posteriormente o comutador canônico $[z, p_z] = i\hbar$ e obter

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad (1.1)$$

assim como todas as outras possibilidades de comutação. Esse raciocínio é intuitivo para o momento angular orbital e leva a conclusões corretas. Contudo, não pode ser utilizado da mesma maneira para o spin, dado que este não tem um análogo clássico e as rotações envolvidas com o operador ocorrem num espaço de coordenadas abstrato (não no usual de posições do momento angular orbital). A proposta deste capítulo é desenvolvermos uma abordagem mais geral de momento angular do que a que foi discutida em capítulos anteriores, que poderá ser empregada ao momento angular orbital e spin.

Notação

➤ Nesta seção a base cartesiana de versores cartesianos $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$ representará exclusivamente o sistema usual de coordenadas espaciais enquanto $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ representará a base de um espaço de coordenadas abstratas arbitrário.

1.1 Momento angular em espaço de rotações abstratos

A nova abordagem que utilizaremos neste capítulo envolverá um conceito já explorado de operadores de deslocamento infinitesimal. Nos primeiros capítulos utilizamos o operador de deslocamento espacial \hat{T} dado por:

$$\hat{T}(dx) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{p} dx \Rightarrow \hat{T}(dx) |x\rangle = |x + dx\rangle$$

e o de deslocamento temporal \hat{U} :

$$\hat{U}(dt) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \Rightarrow \hat{U}(dt) |t\rangle = |t + dt\rangle.$$

De forma generalizada, podemos enunciar um operador de deslocamento de uma grandeza arbitrária α como:

$$\hat{U}(d\alpha) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{G} d\alpha \quad (1.2)$$

cujo propósito consiste em deslocar a grandeza α de um valor infinitesimal $d\alpha$ utilizando o operador gerador $\hat{\mathcal{G}}$, ou seja:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\hat{\mathcal{U}}} |\alpha + d\alpha\rangle \quad (1.3)$$

Para escrevermos $\hat{\mathcal{U}}(d\alpha)$ em nosso caso, primeiramente vamos introduzir as matrizes de rotação num espaço abstrato qualquer. Imaginemos que nosso objetivo é rotacionar um vetor $\mathbf{A} = A_1\mathbf{e}_1 + A_2\mathbf{e}_2 + A_3\mathbf{e}_3$ de um ângulo ϕ (transformando-o em \mathbf{A}') em torno do eixo \mathbf{e}_3 num espaço de coordenadas abstratas (x_1, x_2, x_3) :

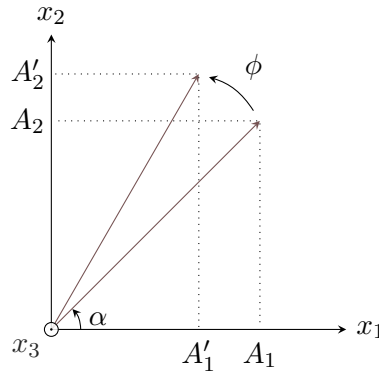


Figura 1.1: Representação de uma rotação em torno do eixo x_3 de um ângulo ϕ .

A transformação envolvida no processo pode ser descrita pela equação matricial

$$\begin{bmatrix} A'_1 \\ A'_2 \\ A'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}$$

Demonstração. Sendo o ângulo do vetor em sua posição inicial chamado θ , temos antes da transformação que:

$$\begin{cases} A_1 = |\mathbf{A}| \cos \theta \\ A_2 = |\mathbf{A}| \sin \theta \\ A_3 = A_3 \end{cases}$$

Após a rotação, somamos o ângulo ϕ nos argumentos de cada componente:

$$\begin{cases} A'_1 = |\mathbf{A}| \cos(\theta + \phi) \\ A'_2 = |\mathbf{A}| \sin(\theta + \phi) \\ A'_3 = A_3 \end{cases}$$

E desenvolvemos de modo que:

$$\begin{cases} A'_1 = |\mathbf{A}| \cos(\theta + \phi) = |\mathbf{A}|(\cos \theta \cos \phi - \sin \theta \sin \phi) = A_1 \cos \phi - A_2 \sin \phi \\ A'_2 = |\mathbf{A}| \sin(\theta + \phi) = |\mathbf{A}|(\sin \theta \cos \phi + \cos \theta \sin \phi) = A_2 \cos \phi + A_1 \sin \phi \\ A'_3 = A_3 \end{cases}$$

Com essas equações, podemos reescrever esse sistema matricialmente como sendo:

$$\begin{bmatrix} A'_1 \\ A'_2 \\ A'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}$$

■

A matriz dessa transformação de rotação será chamada $\mathcal{R}_3(\phi)$ (matriz de rotação em torno de \mathbf{e}_3 de um ângulo ϕ). Por um raciocínio análogo, as matrizes de rotação em torno do eixo \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 também podem ser obtidas com facilidade:

$$\mathcal{R}_1(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}, \mathcal{R}_2(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & \cos \phi & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix}, \mathcal{R}_3(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

Uma propriedade imediata de percebermos é a de que a ordem com que as transformações de rotação ocorrem são de grande importância. Ilustrativamente, se tivermos um paralelepípedo com um lado pintado, podemos ver que uma rotação em torno de \mathbf{e}_1 (no caso $\mathcal{R}_1(\pi/2)$) seguida por uma rotação em torno de \mathbf{e}_2 (no caso $\mathcal{R}_2(\pi/2)$) não equivale a uma rotação em torno de \mathbf{e}_2 seguida por uma em torno de \mathbf{e}_1 :

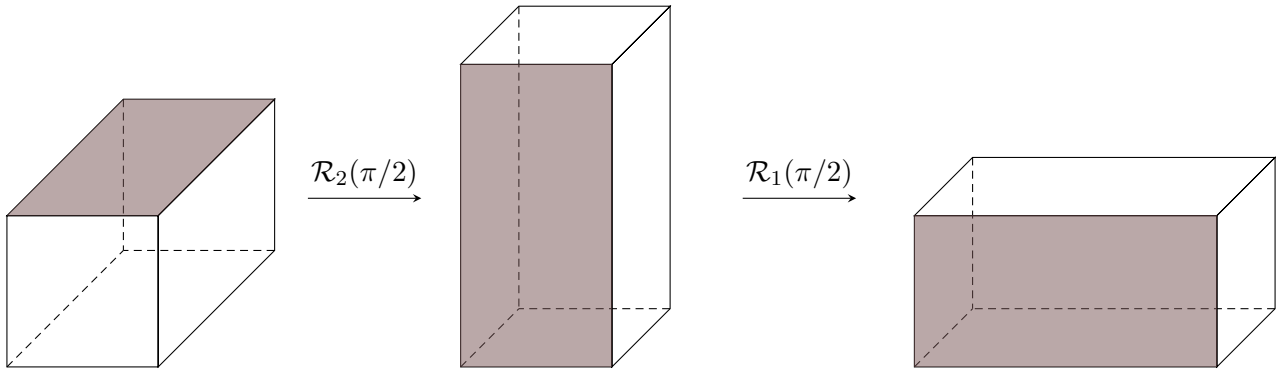


Figura 1.2: Aplicação de uma rotação $\mathcal{R}_2(\pi/2)$ seguida de outra rotação $\mathcal{R}_1(\pi/2)$.

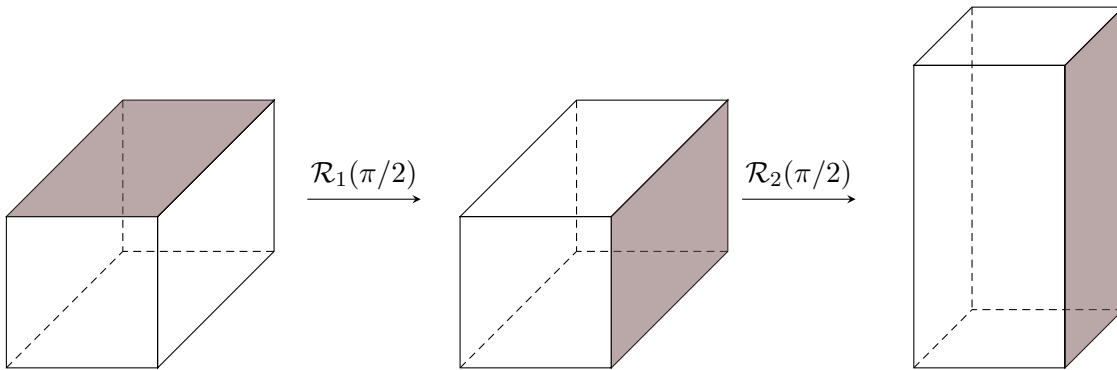


Figura 1.3: Aplicação de uma rotação $\mathcal{R}_1(\pi/2)$ seguida de outra rotação $\mathcal{R}_2(\pi/2)$.

Em termos do vetor \mathbf{A} , podemos descrever essa não equivalência de rotações consecutivas como o seguinte diagrama

$$\begin{array}{ccccc} \mathbf{A} & \xrightarrow{\mathcal{R}_1} & \mathbf{A}' & \xrightarrow{\mathcal{R}_2} & \mathbf{A}'' \\ \mathbf{A} & \xrightarrow{\mathcal{R}_2} & \mathbf{A}''' & \xrightarrow{\mathcal{R}_1} & \mathbf{A}'''' \end{array} \quad (1.5)$$

em que $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}''''$. Perceba que o conceito das transformações consecutivas não poderem ser trocadas entre si (e resultarem no corpo na mesma posição) pode ser traduzido como a não comutação dessas matrizes: $[\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2] \neq 0$. Para descrevermos o operador de deslocamento infinitesimal angular, expandimos as funções seno e cosseno das matrizes de rotação até segunda ordem de uma série de Taylor,

obtemos:

$$\sin \varepsilon \approx \varepsilon \quad \& \quad \cos \varepsilon \approx 1 - \frac{\varepsilon^2}{2}$$

em que escrevemos $\phi \rightarrow \varepsilon$ de forma a destacarmos o fato de estarmos trabalhando com uma grandeza angular infinitesimal. As matrizes de rotação infinitesimais serão dadas dessa forma por:

$$\mathcal{R}_1(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{R}_2(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

e

$$\mathcal{R}_3(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

O diagrama descrito anteriormente (1.5) pode ser traduzido infinitesimalmente nas equações

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathbf{A} \\ \mathbf{A}'' &= \mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathbf{A}' = \mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathbf{A} \\ \mathbf{A}''' &= \mathcal{R}_3(\varepsilon)\mathbf{A} \\ \mathbf{A}'''' &= \mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathbf{A}''' = \mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathbf{A} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Calculando a diferença entre os vetores após as transformações:

$$\mathbf{A}'''' - \mathbf{A}'' = [\mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathcal{R}_2(\varepsilon) - \mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathcal{R}_1(\varepsilon)]\mathbf{A} = [\mathcal{R}_1(\varepsilon), \mathcal{R}_2(\varepsilon)]\mathbf{A}$$

Computemos esse comutador:

- $\mathcal{R}_1(\varepsilon)\mathcal{R}_2(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & -\varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \frac{\varepsilon^3}{2} - \varepsilon \\ \frac{\varepsilon^3}{2} - \varepsilon & \varepsilon & \frac{1}{4}(2 - \varepsilon^2)^2 \end{bmatrix} \\ &\approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & -\varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

- $\mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathcal{R}_1(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \frac{\varepsilon^3}{2} - \varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \frac{\varepsilon^3}{2} - \varepsilon & \frac{1}{4}(2 - \varepsilon^2)^2 \end{bmatrix} \\ &\approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & -\varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

em que desprezamos termos de ordem maior que ε^2 . Portanto concluímos que

$$\begin{aligned} [\mathcal{R}_1(\varepsilon), \mathcal{R}_2(\varepsilon)] &= \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & -\varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & -\varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Como é possível perceber, essa matriz é equivalente a $\mathcal{R}_3(\varepsilon^2)$ subtraída a matriz identidade:

$$\mathcal{R}_3(\varepsilon^2) = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^4}{2} & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^4}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbb{1} + [\mathcal{R}_1(\varepsilon), \mathcal{R}_2(\varepsilon)]$$

$$[\mathcal{R}_1(\varepsilon), \mathcal{R}_2(\varepsilon)] = \mathcal{R}_3(\varepsilon^2) - \mathbb{1} \quad (1.9)$$

Agora somos capazes de definir o operador de deslocamento infinitesimal angular. Os operadores/matrizes relacionados a rotações infinitesimais são $\hat{\mathcal{R}}_j(\varepsilon)$, $j = 1, 2, 3$, e usando a notação $\varepsilon \rightarrow d\phi$ identificamos conforme (1.2):

$$\hat{\mathcal{R}}_i(d\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{G}}_i d\phi$$

Perceba que a partir desse ponto comecei a escrever as matrizes de rotação com a notação típica de operadores $\mathcal{R}_i \rightarrow \hat{\mathcal{R}}_i$, mesmo que seja o mesmo objeto matemático. Isso foi feito de modo a vinculá-lo com o operador gerador $\hat{\mathcal{G}}_i$.

Assim como quando tratamos dos outros exemplos de operadores de deslocamento infinitesimal, sabemos que $\hat{\mathcal{U}}(d\alpha) = \hat{\mathcal{R}}_i(d\phi)$ é adimensional. Para que isso seja cumprido, $\hat{\mathcal{G}}$ tem de ter a mesma unidade de \hbar , que corresponde à de momento angular. Chamemos portanto o operador $\hat{\mathcal{G}}_i = \hat{J}_i$ de momento angular (não identificando-o como orbital ou de spin), obtendo o operador de rotação infinitesimal:

$$\hat{\mathcal{R}}_i(d\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_i d\phi \quad (1.10)$$

Essa nova forma dos operadores (1.6) e (1.7) deve assim como a definição matricial original seguir a relação (1.9), usando (1.10) nessa equação usando a notação de ε novamente:

- $\hat{\mathcal{R}}_1(\varepsilon)\hat{\mathcal{R}}_2(\varepsilon)$:

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_1 \varepsilon \right) \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_2 \varepsilon \right) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_2 \varepsilon - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_1 \varepsilon - \frac{1}{\hbar^2} \hat{J}_1 \hat{J}_2 \varepsilon^2$$

- $\hat{\mathcal{R}}_2(\varepsilon)\hat{\mathcal{R}}_1(\varepsilon)$:

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_2 \varepsilon \right) \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_1 \varepsilon \right) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_1 \varepsilon - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_2 \varepsilon - \frac{1}{\hbar^2} \hat{J}_2 \hat{J}_1 \varepsilon^2$$

Subtraindo a segunda da primeira e igualando ao lado direito de (1.9):

$$[\hat{\mathcal{R}}_1(\varepsilon), \hat{\mathcal{R}}_2(\varepsilon)] = -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = \hat{\mathcal{R}}_3(\varepsilon) - \mathbb{1} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_3\varepsilon^2 - \mathbb{1} = -\frac{i}{\hbar}\hat{J}_3\varepsilon^2$$

$$[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = i\hbar\hat{J}_3 \quad (1.11)$$

que corresponde a um dos mesmos comutadores obtidos anteriormente para o momento angular orbital clássico ao quantizarmos $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ e utilizarmos o comutador posição momento. Perceba que nossa dedução não partimos de nenhuma dessas equações nem usamos o espaço de rotações usual do momento angular orbital $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$. Consequentemente, nossa abordagem por meio dos operadores de rotação infinitesimal foi mais geral e pode abranger diretamente o spin, que não se relaciona com \mathbf{r} e \mathbf{p} nem o espaço de rotações usual.

Perceba que a relação (1.9) poderia ser construída permutando-se os valores $i = 1, 2, 3$, e gerando os outros comutadores entre os operadores de momento angular derivados anteriormente para o momento angular orbital:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad (1.12)$$

A partir dos comutadores (1.12) podemos obter toda a teoria de momento angular encontrada anteriormente, como pincelaremos a seguir. Como $\hat{\mathbf{J}}$ não comuta com suas componentes, usando os mesmos cálculos empregados nas deduções relacionadas ao momento angular orbital, podemos mostrar que ao escolhermos $\hat{\mathbf{J}}^2$ ao invés de $\hat{\mathbf{J}}$, temos que este comuta com todas as componentes J_i , $i = 1, 2, 3$:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0 \quad (1.13)$$

Definindo $|j, m_j\rangle$ como os autoestados de $\hat{\mathbf{J}}^2$ e \hat{J}_3 , pelos mesmos argumentos usados para o momento angular orbital:

$$\hat{J}_3 |j, m_j\rangle = \hbar m_j |j, m_j\rangle \quad \& \quad \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle \quad (1.14)$$

➤ Não confunda a notação aqui empregada para expressar o momento angular generalizado $\hat{\mathbf{J}}$ com a que será utilizada/já foi utilizada para o momento angular total $\hat{\mathbf{J}}!!!$ Os números quânticos j e m_j aqui também não representarão os relacionados ao momento angular total.

Por fim, os operadores de levantamento de momento angular também podem aqui serem estendidos dos utilizados ao tratarmos do momento angular orbital:

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2 \quad \& \quad \hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2 \quad (1.15)$$

assim como todos os seus comutadores e propriedades. Com essa nova abordagem, podemos tratar de qualquer tipo de momento angular sem nos preocuparmos com furos em nosso raciocínio (como ocorreu ao tratarmos o spin como momento angular orbital sem qualquer explicação). Esse tratamento do operador de momento angular pode ser usado não só para momento angular orbital $\hat{\mathbf{L}}$ e spin $\hat{\mathbf{S}}$ mas também o momento angular total $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ (como é evidente de sua definição) ou espaços de spin particulares como o do *isospin* \mathcal{I} (cuja utilidade se relaciona por exemplo ao estudo de partículas que se distinguem fisicamente praticamente pela carga, como o próton e o nêutron).

1.2 Comutadores do operador soma de momento angular

► A partir deste ponto, dado que já foi estabelecido que estamos trabalhando num espaço vetorial arbitrário, voltamos à notação de coordenadas (x, y, z) , deixando claro que não estamos mais lidando com o espaço de coordenadas espaciais usual.

Vamos agora definir o operador $\hat{\mathbf{J}}$ como sendo o operador soma de momentos angulares, de modo que $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$, em que $\hat{\mathbf{J}}_1$ e $\hat{\mathbf{J}}_2$ não necessariamente pertencem ao mesmo espaço de Hilbert. Uma pergunta fundamental é: Como operar $\hat{\mathbf{J}}$? Podemos resolver isso analisamos os comutadores classicamente, ou seja:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}} &= (\hat{J}_{1x} + \hat{J}_{2x})\mathbf{e}_x + (\hat{J}_{1y} + \hat{J}_{2y})\mathbf{e}_y + (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z})\mathbf{e}_z \\ \hat{J}^2 &= (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2)^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2\end{aligned}$$

Lembrando que se quisermos desenvolver as contas quanticamente, teríamos que saber como \hat{J}_{1x} , \hat{J}_{2x} , \hat{J}_{1y} e \hat{J}_{2y} comutam, porém se supormos que conhecemos \hat{J}_{1z} e \hat{J}_{2z} , não temos como fazer a medida desses outros 4 operadores, o que geram várias dificuldades e nuances no cálculo. Dessa forma, trataremos neste capítulo somente do caso em que $[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0$.

Note que podemos escrever $2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$, pois assumimos que $[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0$. Os comutadores conhecidos são (1.12) e (1.13), e queremos saber se o operador de soma se comporta como um operador de momento angular (intuitivamente, podemos pensar que sim, porém não é trivial assumir isso caso os espaços de Hilbert sejam diferentes, tal como $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}}$), portanto, podemos analisar os comutadores.

$$\begin{aligned}[\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= [\hat{J}_{1x} + \hat{J}_{2x}, \hat{J}_{1y} + \hat{J}_{2y}] \\ &= [\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1y}] + [\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{2y}] + [\hat{J}_{2x}, \hat{J}_{1y}] + [\hat{J}_{2x}, \hat{J}_{2y}] \\ &= i\hbar\hat{J}_{1z} + 0 + 0 + i\hbar\hat{J}_{2z} \\ &= i\hbar(\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) \\ &= i\hbar\hat{J}_z\end{aligned}$$

✓

$$\begin{aligned}[\hat{J}^2, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &= \underbrace{[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}]}_{=0} + 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &= 2([\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] + [\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{2z}]) \\ &= 2([\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \underbrace{[\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}]}_{=0} + [\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{2z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2 \cdot \underbrace{[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_{2z}]}_{=0}) \\ &= 2([\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 + [\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{2z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_1) \\ &= 2\left[[\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{1y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{1z}\mathbf{e}_z, \hat{J}_{1z}] \cdot (\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{2y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{2z}\mathbf{e}_z) + \right. \\ &\quad \left. + [\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{2y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{2z}\mathbf{e}_z, \hat{J}_{2z}] \cdot (\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{1y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{1z}\mathbf{e}_z)\right] \\ &= 2\left[(-i\hbar\hat{J}_{1y}\mathbf{e}_x + i\hbar\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_y) \cdot (\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{2y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{2z}\mathbf{e}_z) + \right. \\ &\quad \left. + (-i\hbar\hat{J}_{2y}\mathbf{e}_x + i\hbar\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_y) \cdot (\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{1y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{1z}\mathbf{e}_z)\right] \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y} - \hat{J}_{2y}\hat{J}_{1x} + \hat{J}_{2x}\hat{J}_{1y}) \\ &= 0\end{aligned}$$

✓

Logo, mesmo \hat{J}_1 e \hat{J}_2 estando em espaços de Hilbert diferentes, a soma desses operadores ainda será descrita pela álgebra de momentos angulares, ou seja, nos moldes do que foi mostrado no início do capítulo, tal que equações similares às contidas em (1.14) serão satisfeitas obrigatoriamente.

Façamos então um pequena análise sobre o que foi discutido acima. Em relação ao vetor $\hat{\mathbf{J}}_1$, as medidas simultâneas que podem ser feitas são \hat{J}_1^2 e \hat{J}_{1z} , pois o comutador entre estes é nulo. Para $\hat{\mathbf{J}}_2$, a situação é a mesma, ou seja, as medidas que podem ser feitas simultaneamente são entre os operadores \hat{J}_2^2 e \hat{J}_{2z} . Além disso, podemos medir esses 4 operadores simultaneamente sem problemas, tendo em mente que cada vetor é independente do outro, ou até mesmo pertencem a espaços de Hilbert diferentes, sendo assim o comutador entre eles sempre será nulo. Agora em relação ao operador $\hat{\mathbf{J}}$, precisamos determinar se é ou não possível medi-lo juntamente com os outros, ou melhor, se os operadores \hat{J}^2 e \hat{J}_z comutam com os anteriores. Para resolver esse problema, temos que determinar como os operadores funcionam.

$$\begin{aligned} [\hat{J}_1^2, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} 0 \end{aligned}$$

✓

$$\begin{aligned} [\hat{J}_2^2, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} [\hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} 0 \end{aligned}$$

✓

$$\begin{aligned} [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} 0 \end{aligned}$$

✓

$$\begin{aligned} [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{2z}] \\ &\stackrel{|}{=} 0 \end{aligned}$$

✓

Analisando geometricamente o que falta, temos que se $\hat{\mathbf{J}}_1$ e $\hat{\mathbf{J}}_2$ forem determinados tal que:

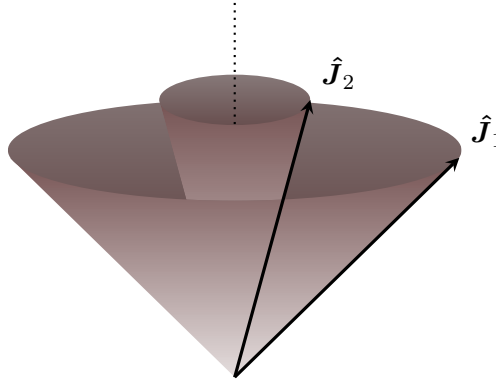


Figura 1.4: Esboço de dois vetores de momento angular e suas possibilidades de se somarem.

A soma entre os vetores não é constante. É fácil ver isso utilizando a regra do paralelogramo para duas posições diferentes de cada vetor. Note que a componente z de cada vetor continua a mesma, tal que a soma dessa componente não muda, independente da orientação x, y do vetor, ou seja, esperamos que a componente z de cada vetor comute, que é exatamente o que vemos nas equações

acima. Calculando então os últimos comutadores, temos:

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_1^2] = \underbrace{[\hat{J}_1^2, \hat{J}_1^2]}_{=0} + \underbrace{[\hat{J}_2^2, \hat{J}_1^2]}_{=0} + 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_1^2] \\
 &= 2\left([\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_1^2] \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \underbrace{[\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_1^2]}_{=0}\right) \\
 &= 2\left[(\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{1y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{1z}\mathbf{e}_z, \hat{J}_1^2) \cdot (\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{2y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{2z}\mathbf{e}_z)\right] \\
 &= 2\left([\hat{J}_{1x}, \hat{J}_1^2]\hat{J}_{2x} + [\hat{J}_{1y}, \hat{J}_1^2]\hat{J}_{2y} + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_1^2]\hat{J}_{2z}\right) \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

O mesmo vale se trocarmos o operador \hat{J}_1^2 por \hat{J}_2^2 , pois será simplesmente uma troca de índices. Por fim:

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}^2, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] \\
 &= [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}] + 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] \\
 &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] \\
 &= 2\left([\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \underbrace{[\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}]}_{=0}\right) \\
 &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 \\
 &= 2[\hat{J}_{1x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{1y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{1z}\mathbf{e}_z, \hat{J}_{1z}] \cdot (\hat{J}_{2x}\mathbf{e}_x + \hat{J}_{2y}\mathbf{e}_y + \hat{J}_{2z}\mathbf{e}_z) \\
 &= 2\left([\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2x} + [\hat{J}_{1y}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2y} + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2z}\right) \\
 &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}) \neq 0
 \end{aligned}$$

Vemos portanto que o comutador não é nulo, de modo que não podemos medir simultaneamente \hat{J}^2 e \hat{J}_{1z} ou então \hat{J}^2 e \hat{J}_{2z} (por cálculo análogo). Resumidamente, podemos criar uma pequena tabela que podemos separar de modo simples o que todas essas contas significam.

Tabela de medidas simultâneas					
\hat{J}_1^2	\hat{J}_{1z}	\hat{J}_2^2	\hat{J}_{2z}	\hat{J}^2	\hat{J}_z
✓	✓	✓	✓	×	–
✓	×	✓	×	✓	✓

Nessa tabela existem muitas informações acopladas que iremos desenvolver melhor. Vamos supor que construímos um equipamento para medidas experimentais de observáveis relacionados a momentos angulares, na construção deste, o intuito é medir simultaneamente as quantidades relacionadas com $\hat{\mathbf{J}}_1$ e $\hat{\mathbf{J}}_2$ de forma simultânea. Para este caso, a primeira linha da tabela é a única que descreve essa possibilidade, de modo que os ✓ representam as quantidades que podem ser medidas juntas e o × o que não pode. O traço – implica que como consequência de saber \hat{J}_{1z} e \hat{J}_{2z} , é trivial calcular \hat{J}_z . Experimentos que seguem essas características possuem uma base chamada “*base desacoplada*”, na qual representamo-a por:

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

Agora vamos supor que estamos interessados no operador soma $\hat{\mathbf{J}}$. As componentes relacionadas a ele que podem ser medidas não incluem os operadores \hat{J}_{1z} e \hat{J}_{2z} , pois mesmo sabendo o que é \hat{J}_z , não é possível saber qual combinação desses 2 operadores que geram a soma, portanto apenas a segunda

linha da tabela é satisfeita. A base que representa essa categoria de experimento é chamada “*base acoplada*”, representada por:

$$|\psi\rangle = |j, m, j_1, j_2\rangle$$

O fato dos 6 operadores não comutarem todos entre si gera esses 2 tipos de base, de modo que **não existe uma única base que faça todos os operadores comutarem!** No entanto existem mecanismos matemáticos que relacionam uma base com a outra, que são os chamados “*coeficientes de Clebesh-Gordan*”, que trataremos na seção seguinte. Antes de prosseguirmos, podemos dar um pequeno exemplo.

Exemplo 1.1 Sistema de dois elétrons de spin 1/2

Tratando de elétrons, estamos falando de férmions de spin 1/2, ou seja, cada um é descrito por seus respectivos s_i e m_i , e satisfazem o princípio de exclusão de Pauli. Além disso, o vetor de estado deve ser sempre antissimétrico, sendo a parte espacial sempre contrária a parte de spin. Para cada elétron, temos:

$$s_1 = \frac{1}{2} \quad m_1 = \pm \frac{1}{2} \quad \& \quad s_2 = \frac{1}{2} \quad m_2 = \pm \frac{1}{2}$$

Como foi dito o vetor de espaço é tratado por duas partes:

$$|\Phi\rangle = |\text{espacial}\rangle \otimes |\text{spin}\rangle$$

onde \otimes representa o produto tensorial de dois elementos de espaços vetoriais diferentes, nesse caso, espaços de Hilbert. Olhando só para parte de spin, temos as seguintes opções:

- Parte de spin simétrica:

$$\begin{aligned} s = 1, m = 1 &\mapsto |\text{spin}\rangle = \left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ s = 1, m = -1 &\mapsto |\text{spin}\rangle = \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ s = 1, m = 0 &\mapsto |\text{spin}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_2 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \right) \end{aligned}$$

- Parte de spin antissimétrica:

$$\begin{aligned} s = 0, m = 0 &\mapsto |\text{spin}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 - \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_2 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \right) \end{aligned}$$

Esse exemplo nos mostra que como utilizar a base desacoplada para descrever a parte de spin de um sistema de dois elétrons, ou seja $|\text{spin}\rangle$ satisfaz as propriedades que seguem a base $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$, em que j_i seria agora s_i .

1.3 Coeficientes de Clebsch-Gordan

Primeiramente vamos estabelecer a relação entre m (associado à \hat{J}_z), m_1 (associado à \hat{J}_{1z}) e m_2 (associado à \hat{J}_{2z}) e j (associado à \hat{J}^2), j_1 (associado à \hat{J}_1^2) assim como a entre j_2 (associado à \hat{J}_2^2). Como $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$, podemos diretamente escrever que

$$m = m_1 + m_2 \quad (1.16)$$

Contudo para j , j_1 e j_2 o mesmo não pode ser feito. Como vimos na seção anterior, o modulo do operador soma de momento angular pode variar, o que implica não ser possível estabelecer uma relação simples como (1.16). O que pode ser feito é indicarmos o intervalo em que j estará contido. Para isso podemos pensar que em termo de vetores clássicos com a relação triangular:

$$||\mathbf{A}| - |\mathbf{B}|| \leq |\mathbf{A} + \mathbf{B}| \leq |\mathbf{A}| + |\mathbf{B}|$$

que intuitivamente significa que a maior soma possível ocorre quando os vetores $\hat{\mathbf{J}}_1$ e $\hat{\mathbf{J}}_2$ estão perfeitamente alinhados consecutivamente na mesma direção e a menor quando estão da mesma forma porém em direções opostas:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (1.17)$$

➤ Note que j_1 não é o módulo de $\hat{\mathbf{J}}_1$ assim como j_2 não é o módulo de $\hat{\mathbf{J}}_2$, portanto a relação acima serve apenas de intuição. A demonstração para esse intervalo pode ser vista de fato na referência [11] no capítulo 7, Exemplo 7.2.

Pensemos agora na dimensão das bases desacoplada e acoplada. Para a desacoplada, sabemos que a dimensão estará relacionada com as possibilidades de $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ e $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$. Como o número dessas possibilidades são $2j_1 + 1$ e $2j_2 + 1$ respectivamente, o número de estados $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ será para um j_1 e j_2 fixos,

$$N_d = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (1.18)$$

Já a acoplada, como $-j \leq m \leq j$ e portanto o número de possibilidades será $2j + 1$ para um j fixo. Considerando todas as possibilidades de j , podemos escrever a dimensão da base $\{|j, m, j_1, j_2\rangle\}$ como

$$N_a = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1)$$

O conhecimento do intervalo (1.17) nos permite conferir que as bases desacoplada e acoplada tem a mesma dimensão. Supondo sem perda de generalidade que $j_1 \geq j_2$, temos que:

$$\begin{aligned} N_a &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j + 1) \\ &= \frac{1}{2} [2(j_1 + j_2) + 1 + 2(j_1 - j_2) + 1] \cdot [j_1 + j_2 - (j_1 - j_2) + 1] \\ &= \frac{1}{2} (4j_1 + 2)(2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \\ &= N_d \end{aligned}$$

em que foi utilizado o fato de termos uma soma de progressão aritmética. Estabelecemos aqui portanto que as bases tem o mesmo número de autoestados, resta-nos saber como podemos relacionar os autoestados de uma com os da outra.

➤ A partir desse ponto será adotada a notação

$$|j, m, j_1, j_2\rangle \rightarrow |j, m\rangle$$

de modo a diminuir a poluição visual ao trabalharmos com as base desacoplada e acoplada.

Como ambas as bases de soma de momento angular tem a mesma dimensão, podemos escrever a acoplada como combinação dos autoestados da desacoplada da seguinte forma

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

Note que para os coeficientes em que $m_1 + m_2$ não for m serão nulos. Usando um projetor com j_1 e j_2 fixos, escrevemos

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

identificando os chamados coeficientes de Clebsch-Gordan

$$C_{m_1, m_2}^{j, m} = \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m\rangle \quad (1.19)$$

cuja utilidade está em relacionar os estados acoplados aos desacoplados.

Exemplo 1.2 Coeficientes de Clebsch-Gordan do exemplo anterior

Baseando-se exemplo anterior em que lidamos com um sistema de dois elétrons (spin 1/2), obtemos os coeficientes de Clebsch-Gordan:

- Parte de spin simétrica:

$$\begin{aligned} s = 1, m = 1 &\mapsto |1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right. \right\rangle \Rightarrow C_{1/2, 1/2}^{1, 1} = 1 \\ s = 1, m = -1 &\mapsto |1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right. \right\rangle \\ &\Rightarrow C_{-1/2, -1/2}^{1, -1} = 1 \end{aligned}$$

Para a última possibilidade simétrica, deduzida no exemplo anterior, usamos o operador de projeção como

$$\mathbb{1} = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \quad (1.20)$$

e obtemos

$$s = 1, m = 0 \mapsto C_{1/2, -1/2}^{1, 0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ e } C_{-1/2, 1/2}^{1, 0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

- Parte de spin anti-simétrica:

Para a única possibilidade anti-simétrica deduzida no exemplo anterior usamos o operador de projeção (1.20) novamente, obtendo

$$s = 0, m = 0 \mapsto C_{1/2, -1/2}^{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ e } C_{-1/2, 1/2}^{1,0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

No exemplo fomos capazes de adquirir os coeficientes de Clebsch-Gordan de maneira rápida dado a simplicidade do sistema. De que maneira podemos obter os coeficientes de Clebsch-Gordan de forma mais algorítmica? Podemos obtê-los com os seguintes passos:

- **Primeiro passo** : Conferimos quais possibilidades geram $m \neq m_1 + m_2$, como sabemos, os coeficientes de Clebsch-Gordan associados à esses casos serão nulos.

- **Segundo passo** : Escolhemos um autoestado conveniente e aplicamos os operadores de escada

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

de forma a trocarmos o número quântico m para um coeficiente que ainda precisamos obter.

- **Terceiro passo** : Utilizar a ortonormalidade entre autoestados para obter os coeficientes restantes, que geralmente envolverá trocarmos o j (como os operadores de levantamento e abaixamento não são capazes de alterá-lo).

Notemos também que o módulo quadrado dos coeficientes deve somar 1 conforme a normalização dos autoestados $|j, m\rangle$:

$$\langle j, m | j, m \rangle = \sum_{m_1, m_2} |C_{m_1, m_2}^{j, m}|^2 = 1 \quad (1.21)$$

Podemos a partir daqui escolher os coeficientes de Clebsch-Gordan como reais. Note que com a normalização se torna evidente que o módulo dos coeficientes de Clebsch-Gordan ao quadrado representam as probabilidades de se ter uma medida em um autoestado da base desacoplada. Para que fique claro como o algoritmo funciona, busquemos alguns exemplos:

Exemplo 1.3 Sistema com $j_1 = 1/2$ e $j_2 = 1/2$

Para $j_1 = 1/2$ e $j_2 = 1/2$ temos que

$$-\frac{1}{2} \leq m_1 \leq \frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \leq m_2 \leq \frac{1}{2}$$

e portanto tanto m_1 quanto m_2 podem assumir apenas os valores $\pm 1/2$. O número quântico j , conforme (1.17) deve ser

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \leq j \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

$$0 \leq j \leq 1$$

o que, como $-j \leq m \leq j$ implica que m pode assumir os valores $-1, 0, 1$ para $j = 1$ e 0 para

$j = 0$. Para trabalharmos com nosso algoritmo, escrevemos uma tabela em que cada entrada representará um coeficiente de Clebsch-Gordan:

Coeficientes de Clebsch-Gordan					
m_1	m_2	Sistema $j_1 = \frac{1}{2}$ e $j_2 = \frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	×	×	×
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	×		×	
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	×		×	
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	×	×	1	×
j		1	1	1	0
m		1	0	-1	0

Nela, escrevemos os valores de m_1 em ordem de maior para menor e completamos com m_2 até termos todas as linhas cheias (o número de linhas das colunas de m_1 e m_2 é N_d (1.18)) e da mesma maneira m é colocado de maior para menor e completamos os j 's de cada m . Conforme nosso algoritmo, começamos zerando os coeficientes em que $m \neq m_1 + m_2$ (já marcados com ×). Depois disso, podemos perceber que duas colunas tem apenas um coeficiente restante, como (1.21) deve ser válido, esses coeficientes tem de ser 1. Sobram dessa forma apenas quatro coeficientes: $C_{1/2,-1/2}^{1,0}$, $C_{-1/2,1/2}^{1,0}$, $C_{1/2,-1/2}^{0,0}$ e $C_{-1/2,1/2}^{0,0}$. Para os dois primeiros, usamos o segundo passo. Escolhemos como autoestado conveniente $|1, 1\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ dado que já o conhecemos e para ele basta aplicarmos o operador de abaixamento uma única vez:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_- |1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\
 &= \hat{J}_{1-} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \hat{J}_{2-} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\
 &= \hbar \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \hbar \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle
 \end{aligned}$$

portanto

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

e

$$C_{1/2,-1/2}^{1,0} = C_{-1/2,1/2}^{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Os dois coeficientes restantes não podem ser obtidos usando operadores de levantamento ou abaixamento, pois há uma mudança em j . Para $C_{0,0,1/2,-1/2}$ e $C_{0,0,-1/2,1/2}$ devemos portanto usar o terceiro passo, a ortonormalidade dos autoestados. Se escrevermos $|0, 0\rangle$ como a combinação linear

$$|0, 0\rangle = A \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + B \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

aplicando $\langle 0, 0|$ temos a equação

$$\langle 0, 0|0, 0\rangle = |A|^2 + |B|^2 = 1$$

e aplicando o autoestado há deduzido $\langle 1, 0|$

$$\begin{aligned}\langle 1, 0|0, 0\rangle &= 0 \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \right) \left(A \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + B \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} B + \frac{1}{\sqrt{2}} A\end{aligned}$$

portanto

$$A = -B$$

aplicando essa relação à que obtivemos da normalização:

$$2|A|^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow B = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

nos permitindo concluir que

$$C_{1/2, -1/2}^{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ e } C_{-1/2, 1/2}^{0,0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Podemos sumarizar as informações obtidas completando a tabela:

Coeficientes de Clebsch-Gordan					
m_1	m_2	Sistema $j_1 = \frac{1}{2}$ e $j_2 = \frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	\times	\times	\times
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	\times	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	\times	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	\times	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	\times	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	\times	\times	1	\times
j		1	1	1	0
m		1	0	-1	0

Exemplo 1.4 Sistema com $j_1 = 1$ e $j_2 = 1/2$

Como o processo de obtenção de cada coeficiente já foi feito em detalhe no exemplo anterior, focaremos neste problema em fixarmos o algoritmo ao invés de nos prolongarmos em todos os cálculos. Como $j_1 = 1$ temos que $-1 \leq m_1 \leq 1$ ou seja, como varia de unidade em unidade, m_1 pode assumir os valores 1, 0 e -1 . Da mesma forma m_2 deve assumir somente os valores $-1/2$ e $1/2$.

Sabendo que $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ por meio de (1.17), temos que j pode assumir os valores $\frac{1}{2}$ e $\frac{3}{2}$. A partir desses valores de j estabelecemos que $-\frac{1}{2} \leq m \leq \frac{1}{2}$ assumindo portanto os valores $-\frac{1}{2}$ e $\frac{1}{2}$ ou $-\frac{3}{2} \leq m \leq \frac{3}{2}$ assumindo os valores $-\frac{3}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ e $\frac{3}{2}$. Podemos portanto montar a tabela como

Coeficientes de Clebsch-Gordan							
m_1	m_2	Sistema $j_1 = 1$ e $j_2 = \frac{1}{2}$					
1	$\frac{1}{2}$	1	\times	\times	\times	\times	\times
1	$-\frac{1}{2}$	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times
0	$\frac{1}{2}$	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times	\times	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times
0	$-\frac{1}{2}$	\times	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
-1	$\frac{1}{2}$	\times	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times	\times	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
-1	$-\frac{1}{2}$	\times	\times	\times	1	\times	\times
j		$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
m		$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

em que já tomamos os coeficientes em que $m \neq m_1 + m_2$ (conforme o primeiro passo) como zero e as colunas com só uma entrada com 1 conforme (1.21). Assim como no exemplo anterior, para obtermos os coeficientes da segunda coluna usamos o operador de abaixamento conforme o segundo passo na entrada única da primeira coluna $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$:

$$\begin{aligned}\hat{J}_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) \left| 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \hbar\sqrt{2} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \hbar \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle\end{aligned}$$

portanto

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (1.22)$$

e

$$C_{1,-1/2}^{3/2,1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \text{e} \quad C_{0,1/2}^{3/2,1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

Na coluna seguinte, por conveniência, podemos dessa vez usar o operador de levantamento (ainda com o segundo passo) na próxima coluna com apenas uma entrada $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = |1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, obtendo:

$$C_{0,-1/2}^{3/2,-1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad \text{e} \quad C_{-1,1/2}^{3/2,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Na coluna seguinte com dois coeficientes à serem descobertos, usamos o terceiro passo, aproveitando a ortogonalidade do estado

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = A \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + B \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

com o já obtido (1.22) conjuntamente com a condição de normalização

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 1 = |A|^2 + |B|^2$$

de forma a obtermos os coeficientes de Clebsch-Gordan A e B respectivamente:

$$C_{1,-1/2}^{1/2,1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}} \text{ e } C_{0,1/2}^{1/2,1/2} = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

Os últimos dois coeficientes podem ser obtidos também por ortonormalidade com o já encontrado autoestado

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

ou com o operador de abaixamento sobre o estado da coluna anterior

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

fornecendo os valores

$$C_{0,-1/2}^{1/2,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \text{ e } C_{-1,1/2}^{1/2,-1/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}$$

Sumarizamos novamente os resultados com a tabela completa:

Coeficientes de Clebsch-Gordan							
m_1	m_2	Sistema $j_1 = 1$ e $j_2 = \frac{1}{2}$					
1	$\frac{1}{2}$	1	\times	\times	\times	\times	\times
1	$-\frac{1}{2}$	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times
0	$\frac{1}{2}$	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times	\times	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times
0	$-\frac{1}{2}$	\times	\times	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	\times	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
-1	$\frac{1}{2}$	\times	\times	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	\times	\times	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
-1	$-\frac{1}{2}$	\times	\times	\times	1	\times	\times
j		$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
m		$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

Tendo em mente a definição dos coeficientes de Clebsch-Gordan em (1.19), podemos tentar escrever os autoestados da base acoplada em termos da base desacoplada a partir do mesmo raciocínio. Vamos supor então que podemos escrever:

$$\begin{aligned} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= \sum_{j,m} A |j, m\rangle \\ &= \mathbb{1} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \\ &= \sum_{j,m} |j, m\rangle \langle j, m | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle \end{aligned}$$

Por comparação podemos dizer que:

$$A = \langle j, m | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle$$

Note que com a definição (1.19), é imediato inferir que A é simplesmente o conjugado complexo dos coeficientes de Clebsch-Gordan. A partir da eq. (1.21), podemos escolher os coeficientes como sendo sempre reais, de modo que o complexo conjugado será simplesmente igual ao normal, o que nos dá que:

$$A = C_{m_1, m_2}^{j, m}$$

Portanto, de forma análoga à descrição dos autoestados desacoplados em termos dos estados acoplados, podemos escrever os autoestados acoplados em termos dos desacoplados com os mesmos coeficientes de Clebsch-Gordan, porém somando de formas diferentes:

$$\begin{aligned} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= \sum_{j, m} C_{m_1, m_2}^{j, m} |j, m\rangle \\ |j, m\rangle &= \sum_{m_1, m_2} C_{m_1, m_2}^{j, m} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \end{aligned} \quad (1.23)$$

Com essas ferramentas, podemos tentar somar 3 momentos angulares $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_3$ com esse formalismo.

Exemplo 1.5

Vamos supor que os números quânticos de momento angular total sejam $j_1 = 2$, $j_2 = 1$ e $j_3 = 1$, de modo que queremos somar $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_3$. Definindo um vetor auxiliar $\hat{\mathbf{J}}' := \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_3$, temos um número quântico j' auxiliar também. Para determinar os valores possíveis de j' , podemos usar a eq. (1.17) tal que:

$$|j_2 - j_3| \leq j' \leq j_2 + j_3 \Rightarrow 0 \leq j' \leq 2$$

Ou seja, $j' \in \{0, 1, 2\}$. Com isso, podemos associar cada valor de j' com um vetor de módulo igual à j' , ou seja:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_0 &\rightarrow j' = 0 \quad (\text{Vetor de módulo } 0) \\ \mathbf{v}_1 &\rightarrow j' = 1 \quad (\text{Vetor de módulo } 1) \\ \mathbf{v}_2 &\rightarrow j' = 2 \quad (\text{Vetor de módulo } 2) \end{aligned}$$

Com isso, temos 3 possibilidades de escrever o vetor soma $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} &= \hat{\mathbf{J}}_1 + \mathbf{v}_0 \Rightarrow j \in \{2\} \\ \hat{\mathbf{J}} &= \hat{\mathbf{J}}_1 + \mathbf{v}_1 \Rightarrow j \in \{1, 2, 3\} \\ \hat{\mathbf{J}} &= \hat{\mathbf{J}}_1 + \mathbf{v}_2 \Rightarrow j \in \{0, 1, 2, 3, 4\} \end{aligned}$$

Portanto, o vetor soma $\hat{\mathbf{J}}$ possui módulo que varia de 0 à 4 (ignorando as constantes \hbar que descrevem j). Quando dizemos que $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}'$, podemos escrever os estados desacoplados em termos dos estados acoplados, de modo que:

$$\begin{aligned} |j, m\rangle &= \sum_{m_1, m'} C_{m_1, m'}^{j, m'} |j_1, m_1, j', m'\rangle \\ &= \sum_{m_1, m'} C_{m_1, m'}^{j, m} \sum_{m_2, m_3} C_{m_2, m_3}^{j', m'} |j_1, m_1, j_2, m_2, j_3, m_3\rangle \end{aligned}$$

Nesta última passagem, o que basicamente fizemos foi abrir um dos coeficientes de Clebsch-Gordan em 2 outros coeficientes mais simples de serem calculados, e como consequência o autoestado corresponde a

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \otimes |j_3, m_3\rangle$$

Vamos agora supor que tenhamos N vetores que seguem a álgebra de momentos angulares, tal que a soma é dada por:

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{J}}_i$$

tal que $\hat{\mathbf{J}}_N$ é definido como sendo o vetor de maior módulo, ou seja, a soma é definida em ordem crescente de módulo. Sendo assim, se supormos que:

$$j_N > \sum_{i=1}^{N-1} j_i \Rightarrow j_{\text{menor possível}} = j_N - \sum_{i=1}^{N-1} j_i$$

Agora se supormos que:

$$j_N \leq \sum_{i=1}^{N-1} j_i \Rightarrow j_{\text{menor possível}} = 0$$

Devido ao fato de que $j \geq 0$. Além disso, o maior valor possível de j é dado simplesmente pela soma de todos os j_i 's presentes no problema. Classicamente podemos ver isso como vetores de módulo j_i , ou seja, se pegarmos três vetores de momento angular como os do exemplo anterior e tratarmos-os classicamente, temos a seguinte interpretação:

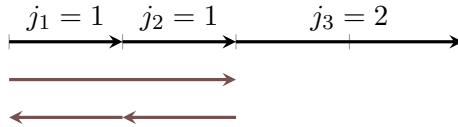


Figura 1.5: Neste exemplo podemos ver que o $j_N = j_3 = 2$, que o menor valor possível de j é o zero e que o maior possível é 4, isso nos mostra os limites inferior e superior do conjunto de valores que j pode assumir, ou seja, confirmamos de forma representativa que $j \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ para o conjunto de j 's fornecido. (As outras possibilidades de representação foram omitidas por simplicidade.

Esse método simplifica bastante a forma de determinar a quantidade de valores possíveis que j pode assumir em um sistema. Por exemplo, somar 5 vetores de momento angular pode gerar um trabalho enorme para algo que pode ser determinado de forma bem mais simples utilizando este método.

1.3.1 Aplicação no átomo de Hidrogênio

Vimos anteriormente que podemos escrever a hamiltoniana do átomo de hidrogênio considerando apenas o efeito de acoplamento spin-órbita por:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

Para encontrar os autoestados dessa hamiltoniana, definimos $\hat{\mathcal{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ que segue uma álgebra de soma de momentos angulares (em espaços de Hilbert distintos), de tal forma que podemos escrever:

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2)$$

Com isso, reescrevemos a hamiltoniana por:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{r} + \frac{1}{16\pi\epsilon_o} \frac{Ze^2}{m^2c^2} \frac{1}{r^3} (\hat{\mathcal{J}}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \\ &\quad \Big| \\ &= \hat{\mathcal{H}}_o + \frac{k}{r^3} (\hat{\mathcal{J}}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)\end{aligned}$$

Tendo em mente que $\hat{\mathcal{J}}$ segue a álgebra de soma de momentos angulares, podemos afirmar as seguintes regras de comutação:

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

Isso nos faz mudar a forma de escrever os autoestados, ou seja:

$$|n, \ell, m_\ell, s, m_s\rangle \mapsto |n, \ell, s, j, m_j\rangle,$$

pois m_ℓ e m_s não são autovalores da hamiltoniana quando consideramos o acoplamento spin-órbita, mas j e m_j são. Com essa interpretação, podemos aplicar os coeficientes de Clebsch-Gordan para escrever um estado em função do outro, ou seja:

$$|n, \ell, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} C_{m_\ell, m_s}^{j, m_j} |n, \ell, m_\ell, s, m_s\rangle$$

Dessa forma, podemos calcular o valor esperado dos autoestados como:

$$\begin{aligned}\langle E'_n \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle \\ &\quad \Big| \\ &= \langle n, \ell, s, j, m_j | \hat{\mathcal{H}} | n, \ell, s, j, m_j \rangle \\ &\quad \Big| \\ &= \sum_{m'_\ell, m'_s} C_{m'_\ell, m'_s}^{j, m_j} \langle n, \ell, m'_\ell, s, m'_s | \hat{\mathcal{H}} \sum_{m_\ell, m_s} C_{m_\ell, m_s}^{j, m_j} | n, \ell, m_\ell, s, m_s \rangle\end{aligned}$$

Bibliografia

Livros

- [1] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 2^a ed. (Addison-Wesley Publishing Company, Inc, Boston, 1980).
- [2] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 1^a ed. (Addison-Wesley Publishing Company, Inc, Boston, 1994).
- [3] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2^a ed. (Pearson Prentice Hall, Hoboken, 2004).
- [4] L. Landau & E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, 3^a ed. (Pergamon Press, Oxônia, 1977).
- [5] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, 3^a ed. (John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, 2003).
- [6] R. J. Finkelstein., *Nonrelativistic mechanics*, 1^a ed. (W. A. Benjamin, California, 1973).
- [7] R. Eisberg & R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, 2^a ed. (John Wiley & Sons, Hoboken, 1985).
- [8] G. B. Arfken & H. B. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 6^a ed. (Academic Press, Boston, 2000).
- [9] T. S. Chitara, *An introduction to orthogonal polynomials*, 13^a ed. (Gordon and Breach Science Publishers, New York–London–Paris, 1978),
- [10] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, 2^a ed. (McGraw-Hill, Nova York, 1968).
- [11] N. Zettili, *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, 2^a ed. (Wiley, United Kingdom, 2009).
- [12] M. D. Schwartz, *Quantum Field Theory and the Standard Model*, 1^a ed. (Cambridge University Press, New York, 2014).

Artigos científicos

- [13] F. Marcellán & R. Álvarz-Nodarse, *On the “Favard theorem” and its extensions*, Journal of Computational and Applied Mathematics **127**, 231–254 (2001)
DOI: [10.1016/s0377-0427\(00\)00497-0](https://doi.org/10.1016/s0377-0427(00)00497-0)
- [14] A. Iserles & M. Webb, *A Differential Analogue of Favard’s Theorem*, arXiv (2020)
DOI: [10.48550/arXiv.2012.07400](https://doi.org/10.48550/arXiv.2012.07400)

- [15] E. J. Garboczi, *Three-dimensional mathematical analysis of particle shape using x-ray tomography and spherical harmonics: Application to aggregates used in concrete*, Cement and Concrete Research **32**, 1621-1638 (2002)
DOI: [10.1016/S0008-8846\(02\)00836-0](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(02)00836-0)
- [16] B. Odom, *et al*, "New Measurement of the Electron Magnetic Moment Using a One-Electron Quantum Cyclotron", Physics Review Letters **97**, 030801 (2006)
DOI: [10.1103/PhysRevLett.97.030801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.030801)
- [17] G. Gabrielse, *et al*, "Erratum: New Determination of the Fine Structure Constant from the Electron g Value and QED [*Phys. Rev. Lett.* 97, 030802 (2006)]", Physics Review Letters **99**, 039902 (2007)
DOI: [10.1103/PhysRevLett.99.039902](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.039902)
- [18] F. Reines & C. L. Cowan, *The Reines-Cowan Experiments*, Los Alamos **25**, 1-27 (1997).
DOI: [10.2172/569122](https://doi.org/10.2172/569122)

Links externos

- [19] J. C. Barata, *Capítulo 15 - Soluções de Equações Diferenciais Ordinárias Lineares no Plano Complexo*, Seção 15.3,
URL: <https://bit.ly/Chapter15Barata>
- [20] Professor M does Science, *Identical particles in quantum mechanics*,
URL: <https://bit.ly/IdenticalParticlesQM>
- [21] L. Sorensen, faculty.washington.edu, "Chapter 10 The Hydrogen Atom",
URL: <https://bit.ly/TheHydrogenAtom>
- [22] C. R. Nave, *"Hydrogen Separated Equation Solutions"*, Georgia State University,
URL: <https://bit.ly/HydrogenWavefunctions>
- [23] Frank Wang, resposta a *"How to show orthogonality of associated Laguerre polynomials?"*, StackExchange math,
URL: <https://bit.ly/OrthogonalityOfAssociatedLaguerrePolynomials>
- [24] W. Pauli, *Open letter to the group of radioactive people at the Gauverein meeting in Tübingen*, 1930,
URL: <https://bit.ly/PauliLetter>
- [25] B. Zwiebach, *Quantum Physics III Chapter 2: Hydrogen Fine Structure*, MIT Open Course Ware,
URL: <https://bit.ly/HydrogenFineStructureMIT>
- [26] Nihar Karve, resposta a *"Theoretical calculations of electron g -factor in QED"*, StackExchange physics,
URL: <https://bit.ly/g-factorQED>