Fundamentos Teóricos de Mecânica Quântica

L. R. XIMENES

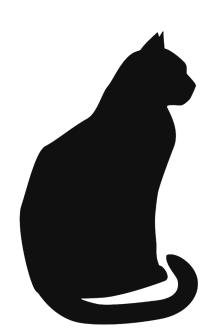
F. GIMENEZ S.

 $\mathsf{T}\mathsf{T}$

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 foram 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 a 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 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 $\hat{,}$ por exemplo \hat{a} ;
- A matriz identidade é escrita por 1;
- Quando quisermos escrever uma probabilidade, utilizaremos $\mathbb{P}(x)$;
- O conjunto dos números naturais é tomado como sendo $\mathbb{N} \equiv \{1, 2, 3, ...\}$ (não incluindo o zero);
- Produtos vetoriais e cartesianos s\(\tilde{a}\) escritos com \(\times\);
- Produtos tensoriais s\(\tilde{a}\) escritos com ⊗;
- Um vetor em coordenadas cilíndricas é escrito como sendo $\mathbf{r}_c = (\rho, \phi, z)$;
- Um vetor em coordenadas esféricas é escrito como sendo $\boldsymbol{r}_e = (\rho, \theta, \phi);$
- Argumentos relacionados a parte radial ρ de alguma equação que não seja ela mesma, por exemplo $\alpha \rho$, denotaremo-as por $\boldsymbol{\lambda}$;
- O símbolo ≡ denota equivalência;
- O símbolo := denota uma definição;

\mathbf{c}			•	
81	$\mathbf{1m}$	91	201	O
	ım	7	ш	O

Prefácio	2
Notações	4
1 Soma de momento angular 1.1 Momento angular em espaço de rotações abstratos	7 7
Bibliografia	17

1 | Soma de momento angular

Anteriormente, de modo a descrevermos o operador de momento angular quanticamente, partimos da definição clássica desta grandeza $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, 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

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

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 $\{i, j, k\}$ representará exclusivamente o sistema usual de coordenadas espaciais enquanto $\{e_1, e_2, e_3\}$ 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 $\hat{\mathcal{T}}$ dado por:

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

e o de deslocamento temporal $\hat{\mathcal{U}}$:

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

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

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

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

$$|\alpha\rangle \stackrel{\hat{\mathcal{U}}}{\to} |\alpha + \mathrm{d}\alpha\rangle$$
 (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) :

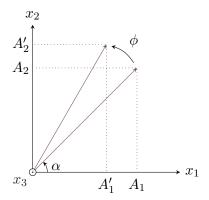


Figura 1.1: Representação de uma rotação em torno do eixo x_3 de um ângulo ϕ .

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:

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

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:

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

Uma propriedade imediata de percebemos é a de que a ordem com que as transformações de rotação ocorrem são de grande importam. Ilustrativamente, se tivermos um paralelepípedo com um lado pintado, podemos ver que uma rotação em torno de e_1 (no caso $\mathcal{R}_1(\pi/2)$) seguida por uma rotação em torno de e_2 (no caso $\mathcal{R}_2(\pi/2)$) não equivale a uma rotação em torno de e_2 seguida por uma em torno de e_1 :

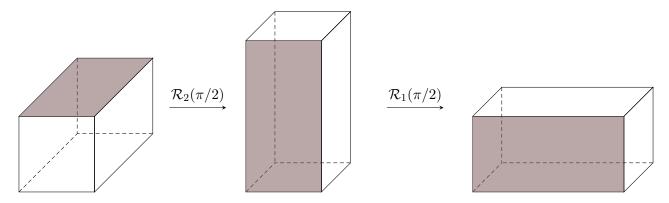


Figura 1.2: Aplicação de uma rotação $\mathcal{R}_2(\pi/2)$ seguida de outra rotação $\mathcal{R}_1(\pi/2)$.

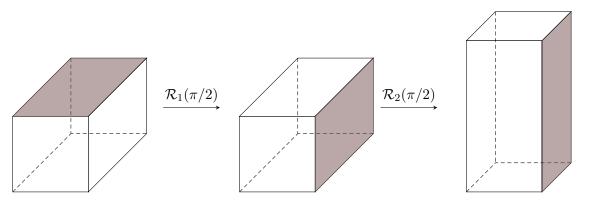


Figura 1.3: Aplicação de uma rotação $\mathcal{R}_1(\pi/2)$ seguida de outra rotação $\mathcal{R}_2(\pi/2)$.

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

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:

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

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

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

e

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

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

$$\mathbf{A}' = \mathcal{R}_{1}(\varepsilon)\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}'' = \mathcal{R}_{2}(\varepsilon)\mathbf{A}' = \mathcal{R}_{2}(\varepsilon)\mathcal{R}_{1}(\varepsilon)\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}''' = \mathcal{R}_{2}(\varepsilon)\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}'''' = \mathcal{R}_{1}(\varepsilon)\mathbf{A}''' = \mathcal{R}_{1}(\varepsilon)\mathcal{R}_{2}(\varepsilon)\mathbf{A}$$

$$(1.8)$$

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:

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

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

• $\mathcal{R}_2(\varepsilon)\mathcal{R}_1(\varepsilon)$.

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

$$\approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \varepsilon^2 & -\varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{bmatrix}$$

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

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

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

$$\mathcal{R}_{3}(\varepsilon^{2}) = \begin{bmatrix}
1 - \frac{\varepsilon^{4}}{2} & -\varepsilon^{2} & 0 \\
\varepsilon^{2} & 1 - \frac{\varepsilon^{4}}{2} & 0 \\
0 & 0 & 1
\end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix}
1 & -\varepsilon^{2} & 0 \\
\varepsilon^{2} & 1 & 0 \\
0 & 0 & 1
\end{bmatrix} = \mathbb{1} + [\mathcal{R}_{1}(\varepsilon), \mathcal{R}_{2}(\varepsilon)]$$

$$[\mathcal{R}_{1}(\varepsilon), \mathcal{R}_{2}(\varepsilon)] = \mathcal{R}_{3}(\varepsilon^{2}) - \mathbb{1}$$
(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 $\varepsilon \to \mathrm{d}\phi$ identificamos conforme (1.2):

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

Perceba que a partir desse ponto comecei a escrever as matrizes de rotação com a notação típica de operadores $\mathcal{R}_i \to \hat{\mathcal{R}}_i$, 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 $\hat{\mathcal{U}}(\mathrm{d}\alpha) = \hat{\mathcal{R}}_i(\mathrm{d}\phi)$ 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:

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

$$[\hat{\mathcal{R}}_{1}(\varepsilon), \hat{\mathcal{R}}_{2}(\varepsilon)] = -\frac{\varepsilon^{2}}{\hbar^{2}}[\hat{J}_{1}, \hat{J}_{2}] = \hat{\mathcal{R}}_{3}(\varepsilon) - \mathbb{1} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_{3}\varepsilon^{2} - \mathbb{1} = -\frac{i}{\hbar}\hat{J}_{3}\varepsilon^{2}$$

$$[\hat{J}_{1}, \hat{J}_{2}] = i\hbar\hat{J}_{3}$$
(1.11)

que corresponde a um dos mesmos comutadores obtidos anteriormente para o momento angular orbital clássico ao quantizarmos $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 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 (i,j,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 \boldsymbol{r} e \boldsymbol{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:

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

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

$$\left[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_i\right] = 0 \tag{1.13}$$

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

$$\hat{J}_3 |j, m_j\rangle = \hbar m_j |j, m_j\rangle \qquad \& \qquad \left[\hat{J}^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle \right]$$
(1.14)

Não confunda a notação aqui empregada para expressar o momento angular generalizado \hat{J} com a que será utilizada/já foi utilizada para o momento angular total \hat{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:

$$\hat{J}_{+} = \hat{J}_{1} + i\hat{J}_{2} \qquad \& \qquad \hat{J}_{-} = \hat{J}_{1} - i\hat{J}_{2}$$
(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{L} e spin \hat{S} mas também o momento angular total $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ (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).

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

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

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, portanto a forma mais simples é seguir o formalismo clássico.

Note que podemos escrever $2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2$, pois estamos tratando o caso clássico e $[\hat{J}_1, \hat{J}_2]$. Os comutadores conhecido 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 qual $\hat{J} = \hat{S} + \hat{L}$), portanto, podemos analisar os comutadores.

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

$$\begin{split} [\hat{J}^2,\hat{J}_z] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\pmb{J}}_1 \cdot \hat{\pmb{J}}_2, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &= \underbrace{[\hat{J}_1^2,\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{J}_2^2,\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}]}_{=0} + 2[\hat{\pmb{J}}_1 \cdot \hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}] \\ &= 2([\hat{\pmb{J}}_1 \cdot \hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{1z}] + [\hat{\pmb{J}}_1 \cdot \hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{2z}]) \\ &= 2([\hat{\pmb{J}}_1,\hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\pmb{J}}_2 + \hat{\pmb{J}}_1 \cdot \underbrace{[\hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{1z}]}_{=0} + [\hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{2z}] \cdot \hat{\pmb{J}}_1 + \hat{\pmb{J}}_2 \cdot \underbrace{[\hat{\pmb{J}}_1,\hat{J}_{2z}]}_{=0}) \\ &= 2([\hat{\pmb{J}}_1,\hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\pmb{J}}_2 + [\hat{\pmb{J}}_2,\hat{J}_{2z}] \cdot \hat{\pmb{J}}_1) \\ &= 2[[\hat{J}_{1x}e_x + \hat{J}_{1y}e_y + \hat{J}_{1z}e_z,\hat{J}_{1z}] \cdot (\hat{J}_{2x}e_x + \hat{J}_{2y}e_y + \hat{J}_{2z}e_z) + \\ &+ [\hat{J}_{2x}e_x + \hat{J}_{2y}e_y + \hat{J}_{2z}e_z,\hat{J}_{2z}] \cdot (\hat{J}_{1x}e_x + \hat{J}_{1y}e_y + \hat{J}_{1z}e_z)] \\ &= 2[(-i\hbar\hat{J}_{1y}e_x + i\hbar\hat{J}_{1x}e_y) \cdot (\hat{J}_{2x}e_x + \hat{J}_{2y}e_y + \hat{J}_{2z}e_z) + \\ &+ (-i\hbar\hat{J}_{2y}e_x + i\hbar\hat{J}_{2x}e_y) \cdot (\hat{J}_{1x}e_x + \hat{J}_{1y}e_y + \hat{J}_{1z}e_z)] \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y} - \hat{J}_{2y}\hat{J}_{1x} + \hat{J}_{2x}\hat{J}_{1y}) \\ &= 0 \end{split}$$

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 dobre o que foi discutido acima. Em relação ao vetor \hat{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{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{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.

$$[\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{z}] = [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{2}^{2}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{2}^{2}, \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}]$$

$$= [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{2z}]$$

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

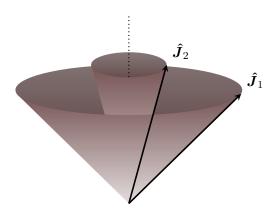


Figura 1.4

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:

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

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:

$$\begin{split} [\hat{J}^{2}, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{J}_{1}^{2} + \hat{J}_{2}^{2} + 2\hat{\boldsymbol{J}}_{1} \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_{2}, \hat{J}_{1z}] \\ &= [\hat{J}_{1}^{2}, \hat{J}_{1z}] + [\hat{J}_{2}^{2}, \hat{J}_{1z}] + 2[\hat{\boldsymbol{J}}_{1} \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_{2}, \hat{J}_{1z}] \\ &= 2[\hat{\boldsymbol{J}}_{1} \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_{2}, \hat{J}_{1z}] \\ &= 2\left([\hat{\boldsymbol{J}}_{1}, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_{2} + \hat{\boldsymbol{J}}_{1} \cdot [\hat{\boldsymbol{J}}_{2}, \hat{J}_{1z}]\right) \\ &= 2[\hat{\boldsymbol{J}}_{1}, \hat{J}_{1z}] \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_{2} \\ &= 2[\hat{\boldsymbol{J}}_{1x}e_{x} + \hat{J}_{1y}e_{y} + \hat{J}_{1z}e_{z}, \hat{J}_{1z}] \cdot (\hat{J}_{2x}e_{x} + \hat{J}_{2y}e_{y} + \hat{J}_{2z}e_{z}) \\ &= 2\left([\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2x} + [\hat{J}_{1y}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2y} + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2z}\right) \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}) \neq 0 \end{split}$$

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
\checkmark	\checkmark	\checkmark	\checkmark	×	_
\checkmark	×	\checkmark	×	\checkmark	\checkmark

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{J}_1 e \hat{J}_2 de forma simultânea. Para este caso, a primeira linha da tabela é a única que descreve essa possibilidade, de modo que os \checkmark representam as quantidades que podem ser medidas juntas e o \times 0 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{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 mais a frente. 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:

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

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:

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

• Parte de spin antissimétrica:

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

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 .

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*, 3ª 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, 2ª ed. (McGraw-Hill, Nova York, 1968).
- [11] N. Zettili, Quantum Mechanics: Concepts and Applications, 2ª ed. (Wiley, United Kingdom, 2009).
- [12] M. D. Schwartz, Quantum Filed Theory and the Standard Model, 1^a ed. (Cambrige 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
- [14] A. Iserles & M. Webb, A Differential Analogue of Favard's Theorem, arXiv (2020)
 - DOI: 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

[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

[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

[18] F. Reines & C. L. Cowan, The Reines-Cowan Experiments, Los Alamos 25, 1-27 (1997).

DOI: 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,

 $\label{eq:url:https://bit.ly/OrthogonalityOfAssociatedLaguerrePolynomials} \textbf{URL:} \ \text{https://bit.ly/OrthogonalityOfAssociatedLaguerrePolynomials}$

[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