Multipletos de (2,3)-Spins-1/2

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 13 de fevereiro de 2020

Conteúdo

1 Introdução **1**

2 Acoplamentos de (2,3)-spins-1/2 **2**

3 Multipletos de (2,3)-spins-1/2 **4**

4 O vetor de estado de 2-spins **6**

4.1 O vetor de estado de 2-spins-1/2 8

5 Considerações finais **13**

1 Introdução

Em um átomo:

Os níveis são rotulados pelo número quântico principal n;

Os níveis possuem subníveis rotulados pelo número quântico orbital l;

Os subníveis possuem orbitais rotulados pelo número quântico azimutal m_l.

Do acima, um orbital é completamente caracterizado pelo vetor de estado $|nlm_l\rangle$.

Segundo o princípio de exclusão de Pauli, no máximo, cada orbital pode ser ocupado por 2 elétrons: Um elétron que possui número azimutal de spin $m_s = \frac{1}{2}$, e outro que possui $m_s = -\frac{1}{2}$; este último também poderá ser grafado como $m_s = \frac{\bar{1}}{2}$. Então, um elétron, em um orbital, é completamente caracterizado pelo vetor de estado $|nlm_lm_s\rangle$. Por exemplo, $\left|210\tfrac{1}{2}\right\rangle$ significa um spin-up no orbital $|210\rangle$: o orbital de momento angular orbital $l = 1$ e projeção $m_l = 0$, encontrado no nível atômico $n = 2$. Por outro lado, $\left|210\tfrac{\bar{1}}{2}\right\rangle$ significa um spin-down no mesmo orbital.

Os números l recebem nomes especiais dados pela convenção de espectroscopia atômica:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \cdots \iff s, p, d, f, g, h, \ldots \tag{1}$$

Então:

O subnível $(nl) = (10)$ é o subnível $1s$;

A configuração $(10)(20)$ é a configuração $(1s)(2s)$;

A configuração $(10)(20)(21)$ é a configuração $(1s)(2s)(2p)$.

O subnível $1s$ possui momento angular orbital $l = 0$ e projeção $m_l = 0$. Então, possui apenas 1 orbital: o orbital $|100\rangle$, ou, na linguagem espectroscópica, o orbital $1s$: é caso único, não de escreve $1s_0$. Segundo Pauli, no máximo, pode ser ocupado por 2 elétrons: $(1s)^2$.

O subnível $2p$ possui momento angular orbital $l = 1$ e projeção $m_l = 1, 0, -1$. Então, possui 3 orbitais: $|211\rangle$, $|210\rangle$, $\left|21\bar{1}\right\rangle$, ou, $2p_{+1}$, $2p_0$, $2p_{-1}$ (respectivamente). Segundo Pauli, no máximo, pode ser ocupado por 6 elétrons: $(2p)^6$.

O subnível $3d$ possui momento angular orbital $l = 2$ e projeção $m_l = 2, 1, 0, -1, -2$. Então, possui 5 orbitais: $|322\rangle$, $|321\rangle$, $|320\rangle$, $\left|32\bar{1}\right\rangle$, $\left|32\bar{2}\right\rangle$, ou, $3d_{+2}$, $3d_{+1}$, $3d_0$, $3d_{-1}$, $3d_{-2}$ (respectivamente). Segundo Pauli, no máximo, pode ser ocupado por 10 elétrons: $(3d)^{10}$.

E assim por diante. . .

2 Acoplamentos de (2,3)-spins-1/2

Um elétron possui spin $s = \frac{1}{2}$ e uma das projeções: $m_s = \frac{1}{2}$ ou $m_s = -\frac{1}{2}$.

Um sistema com 2 elétrons é composto pelos spins $s_1 = \frac{1}{2}$ e $s_2 = \frac{1}{2}$.

Um sistema com 3 elétrons é composto pelos spins $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = \frac{1}{2}$ e $s_3 = \frac{1}{2}$.

As possíveis projeções dos spins s_1, s_2 e s_3 são $m_1 = \pm\frac{1}{2}$, $m_2 = \pm\frac{1}{2}$ e $m_3 = \pm\frac{1}{2}$ (respectivamente) — o subíndice "s" será omitido.

Quando os elétrons se agrupam para formar um sistema, seus spins se somam, ou seja, se acoplam dando origem a um spin S (total). De acordo com o esquema de adição de 2 spins, os possíveis valores do spin total são (Zettili, 2009):

$$S = s_1 + s_2, \dots, |s_1 - s_2|. \tag{2}$$

Vamos exemplificar com o subnível $2p$ preenchido com 2 elétrons: $(2p)^2$. Os spins $s_1 = \frac{1}{2}$ e $s_2 = \frac{1}{2}$ se acoplam dando origem aos valores:

$$S = 1, 0. \tag{3}$$

Sabemos somar 2 spins, então, caso haja 3 spins, devemos fazer a soma dos spins s_1 e s_2, e o resultado da soma, que chamaremos de s_{12}, somamos ao spin s_3.

Vamos exemplificar com o subnível $2p$ preenchido com 3 elétrons: $(2p)^3$. Os spins $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = \frac{1}{2}$ e $s_3 = \frac{1}{2}$ vão se acoplar. Conforme a regra (2), a soma $s_1 = \frac{1}{2}$ mais $s_2 = \frac{1}{2}$ resulta em:

$$s_{12} = 1, 0. \tag{4}$$

Agora, soma-se $s_{12} = 1$ com $s_3 = \frac{1}{2}$:

$$S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \tag{5}$$

e, por fim, soma-se $s_{12} = 0$ com $s_3 = \frac{1}{2}$:

$$S = \frac{1}{2}. \tag{6}$$

3 Multipletos de (2,3)-spins-1/2

O vetor de estado $|\cdots : SM\rangle$ é o vetor do estado de spin total S e projeção total M. Para cada S, há $2S+1$ valores de M (Zettili, 2009):

$$M = S, S-1, \ldots, -S+1, -S. \tag{7}$$

O acoplamento dos spins do exemplo $(2p)^2$ resultou em spin total $S = 1, 0$. Isso implica em: $2S+1 = 3, 1$ (respectivamente).

Então, o acoplamento de **2-spins-1/2** dá origem a um **tripleto** ($2S+1=3$):

$$\begin{gathered} \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 11\right\rangle, \\ \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 10\right\rangle, \\ \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 1\bar{1}\right\rangle, \end{gathered} \tag{8}$$

e também a um **singleto** ($2S+1=1$):

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 00\right\rangle, \tag{9}$$

totalizando 4 vetores de estado.

O acoplamento dos spins do exemplo $(2p)^3$ resultou em $S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$, quando o acoplamento intermediário foi $s_{12} = 1$, e resultou em $S = \frac{1}{2}$, quando o acoplamento intermediário foi $s_{12} = 0$. O resultado $S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$, implica em $2S+1 = 4, 2$ (respectivamente), e o resultado $S = \frac{1}{2}$, repete $2S+1 = 2$.

Portanto, o acoplamento de **3-spins-1/2** dá origem a um **quarteto** ($2S+1=4$):

$$
\begin{aligned}
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{3}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{3}{2}\frac{\bar{1}}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{3}{2}\frac{\bar{3}}{2}\right\rangle,
\end{aligned}
\tag{10}
$$

e também a um **dubleto** $(2S+1=2)$:

$$
\begin{aligned}
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=1)\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{\bar{1}}{2}\right\rangle,
\end{aligned}
\tag{11}
$$

e também a outro **dubleto**:

$$
\begin{aligned}
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=0)\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}(s_{12}=0)\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{\bar{1}}{2}\right\rangle,
\end{aligned}
\tag{12}
$$

totalizando 8 vetores de estado.

OBSERVAÇÃO:

O caso do subnível $2p$ preenchido com 1 elétron: $(2p)^1$, não resulta em acoplamento (é óbvio), mas resulta na formação de um **dubleto**. Como só há 1 elétron, o spin total é $S=\frac{1}{2}$, o que implica em $2S+1=2$ e 2 vetores de estado (os famosos spin-up e spin-down):

$$
\begin{aligned}
&\left|\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\
&\left|\frac{1}{2} : \frac{1}{2}\frac{\bar{1}}{2}\right\rangle.
\end{aligned}
\tag{13}
$$

4 O vetor de estado de 2-spins

O vetor de estado de 2-spins é determinado pelos coeficientes de Clebsch-Gordan. As tabelas que trazem os valores dos coeficientes de Clebsch-Gordan não utilizam a notação tradicional $(s_1, m_1, s_2, m_2, S, M)$. Elas usam a notação $(a, \alpha, b, \beta, c, \gamma)$. Como se vê, a tradução entre as linguagens é:

$$(a, \alpha, b, \beta, c, \gamma) \iff (s_1, m_1, s_2, m_2, S, M). \tag{14}$$

De acordo com o esquema de adição de 2 spins, os possíveis valores do spin total são:

$$c = a + b, \ldots, |a - b|. \tag{15}$$

Para cada valor de c, os possíveis valores da projeção do spin total são:

$$\gamma = c, c - 1, \ldots, -c + 1, -c. \tag{16}$$

Lembramos que os valores dos spins são inteiros e meio-inteiros:

$$(a, b) \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots\right\}. \tag{17}$$

Para cada valor de a, os possíveis valores da projeção do primeiro spin são:

$$\alpha = a, a - 1, \ldots, -a + 1, -a. \tag{18}$$

Para cada valor de b, os possíveis valores da projeção do segundo spin são:

$$\beta = b, b - 1, \ldots, -b + 1, -b. \tag{19}$$

Os valores da projeção total γ são $\gamma = \alpha + \beta$, ou seja, são determinados por meio de combinações dos valores das projeções α e β. As combinações são determinadas com o auxílio de uma tabela: Na indicação das colunas, são colocados os valores de α, e, na indicação das linhas, os valores de β. Nas intersecções, coloca-se o resultado da soma $(\alpha + \beta)$:

$$\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccc} a & a-1 & \cdots & -a \end{array} \quad \leftarrow \alpha \\
\begin{array}{c} b \\ b-1 \\ \vdots \\ -b \end{array} & \begin{bmatrix} a+b & a-1+b & \cdots & -a+b \\ a+b-1 & a-1+b-1 & \cdots & -a+b-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a-b & a-1-b & \cdots & -a-b \end{bmatrix} \\
\uparrow \beta & \uparrow \gamma
\end{array} \tag{20}$$

O operador de spin total $\mathbf{S}$ é o resultado da adição do operador de primeiro spin $\mathbf{S}_1$ com o operador de segundo spin $\mathbf{S}_2$:

$$\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}. \tag{21}$$

O vetor de estado de 2-spins $|ab : c\gamma\rangle$ é autovetor do operador de spin total (ao quadrado) e também da componente z desse mesmo operador:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 |ab : c\gamma\rangle &= c(c+1) |ab : c\gamma\rangle , \\ S_z |ab : c\gamma\rangle &= \gamma |ab : c\gamma\rangle . \end{aligned} \tag{22}$$

Ademais, também é autovetor do quadrado do operador de primeiro spin e do quadrado do operador de segundo spin:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_1^2 |ab : c\gamma\rangle &= a(a+1) |ab : c\gamma\rangle , \\ \mathbf{S}_2^2 |ab : c\gamma\rangle &= b(b+1) |ab : c\gamma\rangle . \end{aligned} \tag{23}$$

De acordo com o esquema de adição de 2 spins, o vetor de estado de 2-spins pode ser expandido em termos do produto dos kets $|a\alpha\rangle$ e $|b\beta\rangle$:

$$|ab : c\gamma\rangle = \sum_{\alpha,\beta} C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta} |a\alpha\rangle |b\beta\rangle . \tag{24}$$

Na expanção (24), as amplitudes de probabilidade $C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta}$ são os coeficientes de Clebsch-Gordan, e os kets $|a\alpha\rangle$ e $|b\beta\rangle$ são os vetores de base dos operadores de primeiro e segundo spin (respectivamente).

4.1 O vetor de estado de 2-spins-1/2

Nesta subseção, vamos substituir $a = \frac{1}{2}$ e $b = \frac{1}{2}$ nas equações que aparecem no início da [seção 4].

De acordo com (18) e (19), os valores das projeções dos spins-1/2 são:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \\ \beta &= \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{25}$$

De acordo com (15) e (16), os valores do spin total e de sua projeção são:

$$\begin{aligned} c = 1 \quad &\Longrightarrow \quad \gamma = 1, 0, -1; \\ c = 0 \quad &\Longrightarrow \quad \gamma = 0. \end{aligned} \tag{26}$$

Com o auxílio da tabela (20), as combinações que geram os valores das projeções γ são:

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} +\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array} \leftarrow \alpha \\ \begin{array}{c} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array} & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ \uparrow \beta & \uparrow \gamma \end{array} \tag{27}$$

Por causa dos valores de γ, são possíveis 3 vetores (tripleto) com spin total $c = 1$:

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} : 1\gamma \right\rangle = \sum_{\alpha = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \sum_{\beta = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}\alpha\frac{1}{2}\beta} \left| \frac{1}{2}\alpha \right\rangle \left| \frac{1}{2}\beta \right\rangle, \tag{28}$$

e 1 vetor (singleto) com spin total $c = 0$:

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} : 0\gamma \right\rangle = \sum_{\alpha = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \sum_{\beta = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} C^{0\gamma}_{\frac{1}{2}\alpha\frac{1}{2}\beta} \left| \frac{1}{2}\alpha \right\rangle \left| \frac{1}{2}\beta \right\rangle. \tag{29}$$

Vamos explicitar o tripleto (28), primeiro, resolvendo a somatória em β:

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:1\gamma\right\rangle = \sum_{\alpha=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\left\{C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}\alpha\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\alpha\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}\alpha\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\alpha\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}, \tag{30}$$

em seguida, resolvendo a somatória em α:

$$\begin{aligned}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:1\gamma\right\rangle = {} & C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \\ & + C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{1\gamma}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle.\end{aligned} \tag{31}$$

O livro (D. A. Varshalovich, 1988) traz expressões algébricas para os coeficientes de Clebsch-Gordan. Aqui vamos reproduziz as fórmulas para terminar de escrever (31), quer dizer, as expressões adaptadas para $c = 1$ e $b = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} C^{1\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1+\gamma}{2\cdot 1}}, && \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\ &= 0, && \text{caso contrário,} \\ C^{1\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1-\gamma}{2\cdot 1}}, && \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\ &= 0, && \text{caso contrário.} \end{aligned} \tag{32}$$

Como se vê, os coeficientes (32) são para qualquer valor de a. Ademais, não dependem explicitamente dos valores de α, todavia, para terem valor diferente de zero, precisam estar de acordo com os resultados da tabela (27): respeitar a soma $\alpha + \beta = \gamma$.

O TRIPLETO COM PROJEÇÃO $\gamma = 1$:

Para $\alpha + \frac{1}{2}(\beta) = 1(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} C^{11}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 1, \\ C^{11}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \end{aligned} \tag{33}$$

e, para $\alpha - \frac{1}{2}(\beta) = 1(\gamma)$, não existe combinação:

$$
\begin{aligned}
C^{11}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{11}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0.
\end{aligned} \tag{34}
$$

Substituindo (33) e (34) em (31), tem-se 2-spins-1/2 na projeção up:

$$
\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 11\right\rangle = \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{35}
$$

O TRIPLETO COM PROJEÇÃO $\gamma = -1$:

Para $\alpha + \frac{1}{2}(\beta) = -1(\gamma)$, não existe combinação:

$$
\begin{aligned}
C^{1-1}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{1-1}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0,
\end{aligned} \tag{36}
$$

e, para $\alpha - \frac{1}{2}(\beta) = -1(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = -\frac{1}{2}$:

$$
\begin{aligned}
C^{1-1}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{1-1}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 1.
\end{aligned} \tag{37}
$$

Substituindo (36) e (37) em (31), tem-se 2-spins-1/2 na projeção down:

$$
\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 1-1\right\rangle = \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle. \tag{38}
$$

O TRIPLETO COM PROJEÇÃO $\gamma = 0$:

Para $\alpha + \frac{1}{2}(\beta) = 0(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = -\frac{1}{2}$:

$$
\begin{aligned}
C^{10}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{10}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{39}
$$

e, para $\alpha - \frac{1}{2}(\beta) = 0(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} C^{10}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}}, \\ C^{10}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \tag{40}$$

Substituindo (39) e (40) em (31), os 2-spins-1/2 sobrepõem suas projeções up e down:

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 10\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{41}$$

Agora vamos explicitar o singleto (29). Resolvendo as somatórias em α e em β:

$$\begin{aligned} \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 0\gamma\right\rangle = {} & C^{0\gamma}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{0\gamma}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \\ & + C^{0\gamma}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{0\gamma}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle. \end{aligned} \tag{42}$$

Como o único valor possível de γ é $\gamma = 0$, a equação (42) se torna:

$$\begin{aligned} \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2} : 00\right\rangle = {} & C^{00}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{00}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \\ & + C^{00}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + C^{00}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle. \end{aligned} \tag{43}$$

Os coeficientes de Clebsch-Gordan para $c = 0$ e $b = \frac{1}{2}$ são (D. A. Varshalovich, 1988):

$$\begin{aligned} C^{0\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{0-\gamma+1}{2\cdot 0+2}}, && \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\ &= 0, && \text{caso contrário,} \\ C^{0\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{0+\gamma+1}{2\cdot 0+2}}, && \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\ &= 0, && \text{caso contrário.} \end{aligned} \tag{44}$$

O SINGLETO DE PROJEÇÃO $\gamma = 0$:

Para $\alpha + \frac{1}{2}(\beta) = 0(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = -\frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} C^{00}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{00}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{45}$$

e, para $\alpha - \frac{1}{2}(\beta) = 0(\gamma)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} C^{00}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}}, \\ C^{00}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \tag{46}$$

Substituindo (45) e (46) em (43), os 2-spins-1/2 sobrepõem suas projeções up e down:

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:00\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{47}$$

SOBRE A SIMETRIA:

Vamos organizar as expressões do tripleto e a expressão do singleto em um mesmo local para examinarmos a simetria dos vetores de estado:

$$\begin{aligned} \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:11\right\rangle &= \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\ \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:10\right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \\ \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:1\bar{1}\right\rangle &= \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle, \\ \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}:00\right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle. \end{aligned} \tag{48}$$

A estrutura do singleto é assimétrica, quer dizer, se ocorrer o intercâmbio do par de spins, o sinal do vetor de estado troca de sinal:

$$
\begin{aligned}
|ab:00\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}\,|a\rangle\,|b\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\,|a\rangle\,|b\rangle\,, \\
|ba:00\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}\,|b\rangle\,|a\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\,|b\rangle\,|a\rangle\,, \\
&= -\left\{-\sqrt{\frac{1}{2}}\,|b\rangle\,|a\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}\,|b\rangle\,|a\rangle\right\}, \\
&= -\,|ab:00\rangle\,.
\end{aligned} \tag{49}
$$

É fácil de descobrir que a estrutura do tripleto é simétrica, quer dizer, se ocorrer o intercâmbio do par de spins, os sinais dos 3 vetores de estado não se alteram.

5 Considerações finais

Durante o estudo, utilizamos a linguagem

$$
|s_1:SM\rangle = |a:c\gamma\rangle\,, \tag{50}
$$

para tratar o vetor de 1-spin, e a linguagem

$$
|s_1 s_2:SM\rangle = |ab:c\gamma\rangle\,, \tag{51}
$$

para tratar o vetor de 2-spins, e fomos induzidos a pensar nos sinais

$$
|s_1 s_2(s_{12})s_3:SM\rangle = |ab(s_{ab})s_3:c\gamma\rangle\,, \tag{52}
$$

para pensar em tratar o vetor de 3-spins.

Enfatizo "pensar", pois não determinamos as expressões dos vetores de 3-spins-1/2. Porém, determinamos que eles formam um quarteto ($s_{12}=1, S=\frac{3}{2}$), um dubleto ($s_{12}=1, S=\frac{1}{2}$), e também outro dubleto ($s_{12}=0, S=\frac{1}{2}$), totalizando 8 vetores de estado. A dedução de suas expressões utiliza teoria de momento angular avançada, os chamados coeficientes $6j$ – pode-se consultar sobre eles em (D. A. Varshalovich, 1988).

Referências

D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. K. (1988). *Quantum Theory of Angular Momentum.* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. , ISBN 9971-50-107-4, 1st edition.

Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics Concepts and Applications.* John Wiley and Sons, Ltd. , ISBN 978-0-470-02678-6, 2nd edition.