O Harmônico Esférico Tensorial

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 19 de janeiro de 2020

Conteúdo

1 Introdução

Um dos principais conceitos da teoria quântica do momento angular é o conceito de adição de momentos angulares: O operador vetorial do momento angular total **J** é o resultado da adição do operador vetorial do momento angular orbital **L** com o operador vetorial do momento angular de spin **S**:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \tag{1}$$

Em componentes cartesianas,

$$\mathbf{J} = (L_x + S_x)\,\hat{e}_x + (L_y + S_y)\,\hat{e}_y + (L_z + S_z)\,\hat{e}_z. \tag{2}$$

Uma partícula de spin S, por exemplo $S = \frac{1}{2}$, em um orbital de momento angular orbital L, por exemplo $L = 1$, está em um estado combinado por funções de momento angular orbital e funções de spin. Este estado, conhecido como harmônico esférico tensorial, é um estado de momento angular total J e projeção M.

Este artigo tem como objetivo apresentar o harmônico esférico tensorial e explicitar o caso do orbital-1 e spin-1/2.

2 A notação adotada

O texto segue a gráfica do livro (D. A. Varshalovich, 1988).

2.1 Para os operadores

$$\begin{aligned}
(L_x, L_y, L_z) &\longleftarrow \text{componentes cartesianas do operador de momento angular orbital,}\\
(L_{+1}, L_0, L_{-1}) &\longleftarrow \text{componentes esféricas do operador de momento angular orbital,}\\
(S_x, S_y, S_z) &\longleftarrow \text{componentes cartesianas do operador de momento angular de spin,}\\
(S_{+1}, S_0, S_{-1}) &\longleftarrow \text{componentes esféricas do operador de momento angular de spin,}\\
(J_x, J_y, J_z) &\longleftarrow \text{componentes cartesianas do operador de momento angular total,}\\
(J_{+1}, J_0, J_{-1}) &\longleftarrow \text{componentes esféricas do operador de momento angular total.}
\end{aligned} \tag{3}$$

TRANSFORMAÇÃO:

$$
\text{componente esférica} \Longleftarrow \text{componente cartesiana}
$$

$$
\begin{aligned}
J_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_x + iJ_y\right), \\
J_0 &= J_z, \\
J_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_x - iJ_y\right).
\end{aligned} \tag{4}
$$

TRANSFORMAÇÃO:

$$
\text{componente cartesiana} \Longleftarrow \text{componente esférica}
$$

$$
\begin{aligned}
J_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_{-1} - J_{+1}\right), \\
J_y &= \frac{i}{\sqrt{2}}\left(J_{-1} + J_{+1}\right), \\
J_z &= J_0.
\end{aligned} \tag{5}
$$

As componentes dos operadores de momento angular orbital e de spin se transformam da mesma maneira que (4) e (5).

2.2 Para as funções

$$
\begin{aligned}
Y_{a\alpha} &\longleftarrow \text{função de momento angular orbital,} \\
a &\longleftarrow \text{momento angular orbital,} \\
\alpha &\longleftarrow \text{projeção de momento angular orbital,} \\
\chi_{b\beta} &\longleftarrow \text{função de momento angular de spin,} \\
b &\longleftarrow \text{momento angular de spin,} \\
\beta &\longleftarrow \text{projeção de momento angular de spin,} \\
Y^{ab}_{c\gamma} &\longleftarrow \text{função de momento angular total,} \\
c &\longleftarrow \text{momento angular total,} \\
\gamma &\longleftarrow \text{projeção de momento angular total.}
\end{aligned} \tag{6}
$$

3 O harmônico esférico tensorial

A função de momento angular total que tratamos neste artigo é autofunção do operador de momento angular total (ao quadrado) e também da componente z desse mesmo operador:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 Y^{ab}_{c\gamma} &= c(c+1) Y^{ab}_{c\gamma}, \\ J_z Y^{ab}_{c\gamma} &= \gamma Y^{ab}_{c\gamma}. \end{aligned} \tag{7}$$

Ademais, também é autofunção do operador de momento angular orbital (ao quadrado) e do operador de spin (ao quadrado):

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y^{ab}_{c\gamma} &= a(a+1) Y^{ab}_{c\gamma}, \\ \mathbf{S}^2 Y^{ab}_{c\gamma} &= b(b+1) Y^{ab}_{c\gamma}. \end{aligned} \tag{8}$$

No livro (D. A. Varshalovich, 1988), $Y^{ab}_{c\gamma}$ recebe o nome de harmônico esférico tensorial. Ele descreve o estado de uma partícula que possui spin $S = b$, momento angular total $J = c$, projeção $M = \gamma$ e momento angular orbital $L = a$.

O operador de momento angular total é o resultado da adição do operador de momento angular orbital com o operador de momento angular de spin, ver (1), então, de acordo com o esquema de adição de dois momentos angulares, o harmônico esférico tensorial pode ser expandido em quantidades do produto das funções $Y_{a\alpha}$ e $\chi_{b\beta}$:

$$Y^{ab}_{c\gamma} = \sum_{\alpha,\beta} C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta} Y_{a\alpha} \chi_{b\beta}. \tag{9}$$

Na expanção (9), os harmônicos esféricos $Y_{a\alpha}$ dependem dos ângulos polares (θ, ϕ), e as amplitudes de probabilidade $C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta}$ são os conhecidos coeficientes de Clebsch-Gordan.

Ainda de acordo com o esquema de adição de dois momentos angulares, os possíveis valores do momento angular total são:

$$c = a + b, \dots, |a - b|. \tag{10}$$

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

$$\gamma = c, c-1, \ldots, -c+1, -c. \tag{11}$$

Lembramos que os valores do momento angular orbital são inteiros:

$$a \in \{0, 1, 2, 3, \ldots\}. \tag{12}$$

Para cada valor de a, os possíveis valores da projeção do momento angular orbital são:

$$\alpha = a, a-1, \ldots, -a+1, -a. \tag{13}$$

Já os valores do spin são inteiros e meio-inteiros:

$$b \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots\right\}. \tag{14}$$

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

$$\beta = b, b-1, \ldots, -b+1, -b. \tag{15}$$

Os valores das projeções γ, sendo $\gamma = \alpha + \beta$, 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 $(\alpha + \beta)$:

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccc} a & a-1 & \cdots & -a \end{array} \quad \leftarrow \alpha \\
\begin{array}{c} b \\ b-1 \\ \vdots \\ -b \end{array} & \begin{bmatrix} a+b & a-1+b & \cdots & -a+b \\ a+b-1 & a-1+b-1 & \cdots & -a+b-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a-b & a-1-b & \cdots & -a-b \end{bmatrix} \\
\uparrow \beta & \qquad \uparrow \gamma
\end{array} \tag{16}
$$

4 O caso do orbital-1 e spin-1/2

Nesta seção, vamos substituir $a = 1$ e $b = \frac{1}{2}$ nas equações da [seção 3].

Os possíveis valores das projeções dos momentos angulares orbital e de spin são:

$$
\begin{aligned}
&\alpha = 1, 0, -1; \\
&\beta = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{17}
$$

De acordo com (10), os possíveis valores do momento angular total e de sua projeção são:

$$
\begin{aligned}
c = \frac{3}{2} \quad &\Longrightarrow \quad \gamma = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}; \\
c = \frac{1}{2} \quad &\Longrightarrow \quad \gamma = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{18}
$$

Com o auxílio da tabela (16), as combinações que geram os valores de γ são:

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccc} 1 & 0 & -1 \end{array} \quad \leftarrow \alpha \\
\begin{array}{c} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array} & \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix} \\
\uparrow \beta & \uparrow \gamma
\end{array} \tag{19}
$$

Por causa dos valores de γ, ver (18), são possíveis 4 estados com momento total-3/2:

$$Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma} = \sum_{\alpha=1,0,-1} \sum_{\beta=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1\alpha\frac{1}{2}\beta} Y_{1\alpha} \chi_{\frac{1}{2}\beta} \ , \tag{20}$$

e 2 estados com momento total-1/2:

$$Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}\gamma} = \sum_{\alpha=1,0,-1} \sum_{\beta=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} C^{\frac{1}{2}\gamma}_{1\alpha\frac{1}{2}\beta} Y_{1\alpha} \chi_{\frac{1}{2}\beta} \ . \tag{21}$$

Vamos explicitar os estados com momento angular total $c = \frac{3}{2}$ (20):

$$\begin{aligned}
Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma} &= \sum_{\alpha=1,0,-1} \sum_{\beta=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1\alpha\frac{1}{2}\beta} Y_{1\alpha} \chi_{\frac{1}{2}\beta} \\
&= \sum_{\alpha=1,0,-1} \left\{ C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1\alpha\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{1\alpha} \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \ + \ C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1\alpha\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} Y_{1\alpha} \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \right\} \\
&= C^{\frac{3}{2}\gamma}_{11\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{11} \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \ + \ C^{\frac{3}{2}\gamma}_{11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} Y_{11} \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\
&\quad + C^{\frac{3}{2}\gamma}_{10\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{10} \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \ + \ C^{\frac{3}{2}\gamma}_{10\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} Y_{10} \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\
&\qquad + C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1-1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{1-1} \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \ + \ C^{\frac{3}{2}\gamma}_{1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} Y_{1-1} \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} .
\end{aligned} \tag{22}$$

Se identificarmos $\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ e $\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ como a função de spin-up e de spin-down, respectivamente, o estado (22) é formado pelos produtos:

$$\begin{aligned}
&\text{função de momento angular orbital} \times \text{função de spin-up}, \\
&\text{função de momento angular orbital} \times \text{função de spin-down}.
\end{aligned} \tag{23}$$

Nota: Dizer “spin-up” é o mesmo que dizer “spin de valor $\frac{1}{2}$ e projeção $\frac{1}{2}$”, então, dizer “spin de valor $\frac{1}{2}$ e projeção $-\frac{1}{2}$” é o mesmo que dizer “spin-down”.

O livro (D. A. Varshalovich, 1988) traz fórmulas algébricas para os coeficientes de Clebsch-Gordan. Aqui vamos reproduziz apenas as fórmulas que nos interessam para terminar de escrever (22). As fórmulas para $c = \frac{3}{2}$ e $b = \frac{1}{2}$ são:

$$
\begin{aligned}
C^{\frac{3}{2}\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{\frac{3}{2}+\gamma}{3}}, \qquad \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\
&= 0, \qquad\qquad\quad \text{caso contrário,} \\
C^{\frac{3}{2}\gamma}_{a\alpha\frac{1}{2}\beta=-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{\frac{3}{2}-\gamma}{3}}, \qquad \text{se } \alpha+\beta=\gamma, \\
&= 0, \qquad\qquad\quad \text{caso contrário.}
\end{aligned}
\tag{24}
$$

Como se vê, os coeficientes (24) são para qualquer a. Ademais, não dependem explicitamente dos valores de α, todavia, para terem valor diferente de zero, precisam estar de acordo com a tabela (19): respeitar a soma $\alpha + \beta = \gamma$.

O ESTADO COM PROJEÇÃO $\gamma = \frac{3}{2}$:

Para $\alpha + \beta\left(\frac{1}{2}\right) = \gamma\left(\frac{3}{2}\right)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = 1$:

$$
\begin{aligned}
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{11\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 1, \\
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{10\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{1-1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0,
\end{aligned}
\tag{25}
$$

e não existe combinação para $\alpha + \beta\left(-\frac{1}{2}\right) = \gamma\left(\frac{3}{2}\right)$:

$$
\begin{aligned}
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{10\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\
C^{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}_{1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0.
\end{aligned}
\tag{26}
$$

Substituindo (25) e (26) em (22), tem-se o spin-up exclusivamente no orbital-11:

$$
Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma=\frac{3}{2}} = Y_{11}\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}. \tag{27}
$$

O ESTADO COM PROJEÇÃO $\gamma = -\frac{3}{2}$:

Para $\alpha + \beta\left(-\frac{1}{2}\right) = \gamma\left(-\frac{3}{2}\right)$, o único coeficiente diferente de zero é o coeficiente com $\alpha = -1$:

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{10\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 1, \end{aligned} \tag{28}$$

e não existe combinação para $\alpha + \beta\left(\frac{1}{2}\right) = \gamma\left(-\frac{3}{2}\right)$:

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{11\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{10\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}_{1-1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \tag{29}$$

Substituindo (28) e (29) em (22), tem-se o spin-down exclusivamente no orbital-1-1:

$$Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma=-\frac{3}{2}} = Y_{1-1}\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}. \tag{30}$$

O ESTADO COM PROJEÇÃO $\gamma = \frac{1}{2}$:

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

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{11\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{10\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}, \\ C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{1-1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \end{aligned} \tag{31}$$

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

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}, \\ C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{10\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}_{1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \tag{32}$$

Substituindo (31) e (32) em (22), tem-se o spin-up no orbital-10 e, em superposição, o spin-down no orbital-11:

$$Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma=\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{10}\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{11}\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}. \tag{33}$$

O ESTADO COM PROJEÇÃO $\gamma = -\frac{1}{2}$:

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

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{11\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{10\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{1-1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}, \end{aligned} \tag{34}$$

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

$$\begin{aligned} C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{10\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}, \\ C^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}_{1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \tag{35}$$

Substituindo (34) e (35) em (22), tem-se o spin-up no orbital-1-1 e, em superposição, o spin-down no orbital-10:

$$Y^{1\frac{1}{2}}_{\frac{3}{2}\gamma=-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1-1}\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{10}\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}. \tag{36}$$

Inspecionando os 4 estados de momento angular total $\frac{3}{2}$, o estado de projeção $\frac{3}{2}$ (27) é exclusivo de spin-up, enquanto que o estado de projeção $-\frac{3}{2}$ (30) é exclusivo de spin-down. Os estados de projeção $\pm\frac{1}{2}$ são misturas de spin-up e spin-down (superposição). Mas o estado de projeção $\frac{1}{2}$ (33) tem amplitude de probabilidade maior para o spin-up, enquanto que o estado de projeção $-\frac{1}{2}$ (36) tem amplitude de probabilidade maior para o spin-down.

5 Conclusão

Conclui-se que o harmônico esférico tensorial é um estado combinado por funções de momento angular orbital e funções de spin. A combinação pode gerar estados exclusivos de spin-up, exclusivos de spin-down, ou estados mistos, com amplitudes de probabilidade que privilegiam o spin up ou o spin down.

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.