

Capítulo 11

Spin e Adição de Momento Angular

Até este momento consideramos que o estado de um elétron encontrasse completamente especificado pela sua função de onda $\Psi(\mathbf{x})$. Neste capítulo mostraremos que o elétron possui um momento angular intrínseco (*spin*), o qual requer a introdução de um grau de liberdade adicional para descrevê-lo. Também estudaremos como compor dois momentos angulares em Mecânica Quântica. Isto permitirá que analisemos o momento angular total de um sistema contendo várias partículas, as quais podem apresentar momento angular orbital e spin.

11.1 Experimento de Stern–Gerlach

Historicamente, a primeira evidência para a existência de um momento angular intrínseco foi dada por Stern e Gerlach em 1920. Estes estudaram o movimento de feixes atômicos na presença de um campo magnético, obtendo resultados não esperados, os quais levaram a introdução do conceito de *spin*. Para compreendermos este experimento devemos saber como uma partícula comporta-se na presença de um campo magnético externo.

11.1.1 Momento de dipolo magnético

Vamos agora obter a relação clássica entre o momento de dipolo magnético de uma partícula pontual e seu momento angular orbital. Para tanto devemos lembrar que, no eletromagnetismo clássico, o momento de dipolo magnético (\mathbf{m}) associado a uma distribuição de correntes $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ é dado por

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int d^3\mathbf{x} \mathbf{x} \wedge \mathbf{J}(\mathbf{x}) , \quad (11.1)$$

onde adotamos o sistema gaussiano de unidades. A densidade de corrente elétrica de uma partícula pontual é

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = q\mathbf{v}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) , \quad (11.2)$$

onde q é a carga elétrica da partícula, \mathbf{x}_p sua posição e \mathbf{v} sua velocidade. Logo, utilizando (11.1) e (11.2) temos que o momento de dipolo magnético de uma partícula satisfaz

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2c} \mathbf{x}_p \wedge \mathbf{v} = \frac{q}{2\mu c} \mathbf{L} , \quad (11.3)$$

com μ sendo a sua massa e \mathbf{L} seu momento angular orbital. No caso de um elétron escrevemos $q = -e$, onde e é a carga do próton, o que resulta em

$$\mathbf{m} = -\frac{e\hbar}{2\mu c} \frac{\mathbf{L}}{\hbar} , \quad (11.4)$$

onde podemos verificar o aparecimento do magneton de Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} = 9,2732 \times 10^{-21} \text{erg/gauss} . \quad (11.5)$$

Um fato interessante sobre a relação (11.4) é que ela nos permite medir o momento angular do sistema \mathbf{L} através da análise do comportamento do sistema na presença de um campo magnético. No que segue, utilizaremos que o momento de dipolo magnético de uma partícula e seu momento angular (em geral!) são proporcionais, sendo que a constante de proporcionalidade depende do inverso da massa.

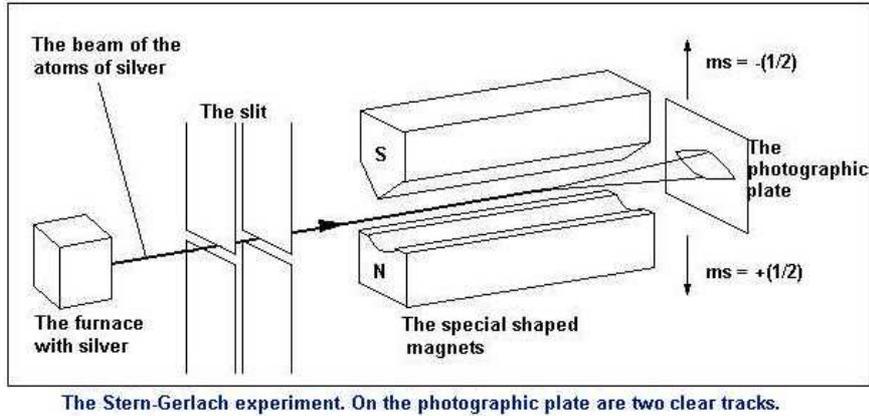


Figura 11.1: Esquema do experimento de Stern e Gerlach.

11.1.2 Descrição do experimento

Consideremos um feixe de átomos passando por uma região de campo magnético cujo módulo varia rapidamente, enquanto sua direção é aproximadamente constante como mostra a figura 11.1.

Assumindo que as dimensões características do problema são muito maiores que a escala natural do sistema quântico, podemos utilizar a Mecânica Clássica para analisar a evolução do pacote de ondas até o anteparo onde os átomos são observados¹. A interação entre o campo magnético e o momento de dipolo magnético do sistema dá origem a uma força

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F} &= -\nabla(-\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}), \\
 &= \nabla(m_z B_z) \simeq m_z \nabla B_z, \\
 &= \frac{q}{2\mu c} L_z \nabla B_z.
 \end{aligned}
 \tag{11.6}$$

Classicamente, a componente z do momento angular do sistema pode ser qualquer e conseqüentemente m_z e \mathbf{F} também. Logo, deveríamos observar átomos em todos os pontos do anteparo como mostra

¹*Exercício:* Explique o porquê deste experimento ser extremamente difícil de realizar com feixes de elétrons livres.

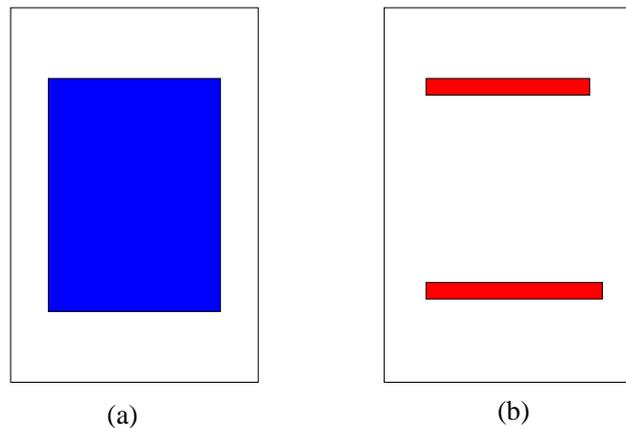


Figura 11.2: (a) Resultado esperado classicamente. (b) Resultado experimental.

a figura 11.2a. Por outro lado, a Mecânica Quântica prevê apenas um conjunto finito de valores para L_z , o que implica que \mathbf{F} pode assumir apenas $2l + 1$ valores discretos. Portanto, devemos observar apenas $2l + 1$ linhas no anteparo, as quais correspondem a átomos com valores diferentes de m .

Num experimento com átomos de alumínio, Stern e Gerlach observaram apenas duas linhas no anteparo; vide figura 11.2b. A explicação para este fato é que o átomo de alumínio possui momento angular total $1/2$. Uma vez que o momento angular orbital dos elétrons pode assumir apenas valores inteiros, devemos interpretar este resultado como um sinal de que os elétrons possuem um momento angular intrínseco, o qual é semi-inteiro e igual a $1/2$.²

Este resultado surpreendente cai como uma luva para a teoria do momento angular que desenvolvemos no capítulo 8, uma vez que a álgebra obedecida pelo momento angular conduz-nos naturalmente a valores inteiros, como os do momento angular orbital, bem como a valores semi-inteiros, como o apresentado pelos elétrons. Logo, é natural

²*Exercício:* Argumente que o momento angular semi-inteiro do sistema está relacionado aos elétrons em vez do núcleo atômico.

associar ao spin operadores hermitianos S_i , os quais obedecem a

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}S_k . \quad (11.7)$$

Antes de estudarmos como podemos representar explicitamente estes operadores para partículas de spin $1/2$ é interessante discutirmos um pouco mais o conceito de spin.

11.1.3 Origem do spin

Dado que o elétron exibe um momento angular intrínseco, além do seu momento angular orbital, somos tentados a interpretá-lo como sendo devido à rotação do elétron em torno de seu eixo, a exemplo do que ocorre com a Terra. Todavia, isto não pode ser verdade, já que se o fosse, este seria um momento angular orbital e forçosamente deveria ser inteiro!

Portanto, a única conclusão que podemos tirar é que o elétron possui um novo grau de liberdade, o qual está associado ao spin. Esta novidade não pode ser explicada pela Mecânica Quântica não relativística, sendo necessário para sua melhor compreensão o uso da teoria relativística de Dirac, a qual foge ao escopo destas notas.

É interessante notar que o momento angular intrínseco de uma partícula pode ser inteiro ou semi-inteiro, dependendo da partícula considerada. Por exemplo, elétrons, prótons e nêutrons possuem spin $1/2$, enquanto que os pions (π^0, π^\pm) e os kaons (K_0, K^\pm) possuem spin zero. São também conhecidas partículas com spin 1, tais como o fóton, Z_0 , W^\pm , e o ρ , e com spin $3/2$, tais como Δ^{++} .

11.1.4 Momento magnético intrínseco

Vimos anteriormente que existe um momento de dipolo magnético associado ao momento angular orbital de partículas carregadas através de (11.3). Analogamente, existe um momento de dipolo magnético associado ao spin. Assumiremos que estes são proporcionais, como em (11.3),

$$\mathbf{m} = g\frac{q}{2\mu c}\mathbf{S} , \quad (11.8)$$

onde o fator $q/2\mu c$ foi introduzido por análise dimensional e g deve ser determinado experimentalmente. O fator g é chamado de constante giro-magnética. Para um elétron

$$\mathbf{m} = -\frac{g}{2} \mu_B \vec{\sigma} , \quad (11.9)$$

onde a constante μ_B é o magneton de Bohr dado por (11.5). O valor de g para o elétron é uma das quantidades medidas com maior precisão em Física, sendo o seu valor numérico

$$g = 2 \times (1,001159652187 \pm 0,000000000004) . \quad (11.10)$$

No caso dos prótons, que também são partículas de spin $1/2$, temos que (11.9) continua válida com a óbvia troca da massa do elétron pela massa do nucleon em (11.5). Experimentos revelam que para o próton $g_P = 2,79$. Mais ainda, nêutrons também são partículas de spin $1/2$ mas de carga nula. É interessante definir neste caso que

$$\mathbf{m}_N = \frac{g_N}{2} \frac{e\hbar}{2\mu_N c} \vec{\sigma} , \quad (11.11)$$

sendo que $g_N = -1,91$. Intuitivamente, é natural supor que \mathbf{m}_N fosse nulo já que carga elétrica do nêutron é nula. O fato de g_N ser diferente de zero indica que o nêutron é um objeto composto cujos constituintes possuem carga elétrica não nula.

Passemos agora ao estudo de como podemos representar as partículas com momento angular intrínseco $1/2$, o que requer a introdução um grau de liberdade extra.

11.2 Spin 1/2

As conseqüências das relações de comutação (11.7) já foram estudadas anteriormente, e o que nos resta fazer é obter uma representação explícita dos operadores S_i para spin $1/2$. Sabemos que podemos diagonalizar \mathbf{S}^2 e S_z simultaneamente

$$\mathbf{S}^2 \varphi_{sm_s} = \hbar^2 s(s+1) \varphi_{sm_s} \quad (11.12)$$

$$S_z \varphi_{sm_s} = \hbar m_s \varphi_{sm_s} \quad (11.13)$$

onde $s = 1/2$ e $m_s = \pm 1/2$. Note que os autovetores do problema acima geram um espaço com $2s + 1 (= 2)$ dimensões. Entretanto, nós já estudamos sistemas com apenas dois estados! Logo, somos naturalmente levados a considerar o espaço vetorial cujos elementos são matrizes coluna da forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

adotando o produto escalar

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = a^* c + b^* d,$$

onde

$$\Phi = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}.$$

Observando o que foi feito anteriormente para sistemas de dois níveis, operadores são dados por matrizes 2×2 , sendo fácil notar que uma representação para os S_i é dada por

$$S_1 = \frac{\hbar}{2} \sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (11.14)$$

$$S_2 = \frac{\hbar}{2} \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (11.15)$$

$$S_3 = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.16)$$

onde esta pode ser verificada através da substituição em (11.7).

Portanto, todo o tratamento de sistema de dois níveis, desenvolvido anteriormente, pode ser aplicado diretamente a sistemas envolvendo partículas com spin 1/2! Por exemplo, nesta representação para os operadores de spin S_i , temos que os estados satisfazendo (11.12) e (11.13) são dados por

$$\varphi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.17)$$

$$\varphi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Mais ainda, toda a estrutura desenvolvida previamente para a evolução temporal de sistemas de dois níveis pode ser também utilizada diretamente sem problema algum.

11.2.1 Precessão do spin num campo magnético

O spin de uma partícula pode manifestar-se através de sua interação com um campo magnético. Por esta razão, vamos discutir rapidamente a precessão que o spin de um elétron sofre quando colocado sob a ação de um campo magnético constante $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. A hamiltoniana que governa a evolução temporal do sistema é dada por

$$H = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.19)$$

onde usamos (11.9) e tomamos $g = 2$. A equação de Schrödinger dependente do tempo escreve-se como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}, \quad (11.20)$$

onde o estado do sistema é

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}.$$

A nossa experiência anterior com sistema de dois níveis mostra que para obtermos a solução deste problema devemos resolver o problema de autovalores de H . É fácil verificar que os autovetores e respectivos autovalores de (11.19) são dados por

$$E_+ = \mu_B B \iff u_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.21)$$

$$E_- = -\mu_B B \iff u_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.22)$$

Escrevendo o estado inicial em função de u_{\pm}

$$\Psi(0) = \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix} = \alpha(0) u_+ + \beta(0) u_-, \quad (11.23)$$

a solução deste problema de valor inicial é dada por

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \alpha(0) u_+ e^{-iE_+t/\hbar} + \beta(0) u_- e^{-iE_-t/\hbar}. \quad (11.24)$$

Para compreendermos o significado físico de (11.24) consideremos um sistema cujo estado inicial seja autovetor de σ_x com autovalor $+1$. Neste caso $\alpha(0) = \beta(0) = 1/\sqrt{2}$ e conseqüentemente

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t/2} \\ e^{i\Omega t/2} \end{pmatrix}, \quad (11.25)$$

onde $\Omega = 2\mu_B B/\hbar$ é a frequência de Larmor. A interpretação deste estado é imediata se calcularmos os seguintes valores esperados.

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \Omega t \quad (11.26)$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \Omega t \quad (11.27)$$

$$\langle S_z \rangle = 0 \quad (11.28)$$

Destas expressões podemos ver claramente que o valor esperado do spin está precessando ao redor do eixo determinado pelo campo magnético³. Note que este é o mesmo comportamento previsto classicamente para um dipolo magnético sob a ação de um campo magnético \mathbf{B} , o qual dá origem a um torque $\mathbf{m} \wedge \mathbf{B}$.

11.2.2 Ressonância Magnética

Vamos agora descrever uma técnica para a medida do fator giro-magnético do próton g_P , ou seja de seu momento de dipolo magnético intrínseco. Conforme vimos na seção anterior, um momento magnético associado a uma partícula de spin 1/2 imerso em um campo uniforme \mathbf{B} na direção z apresenta dois estados de energia bem definidos. Consideraremos um dipolo magnético que se encontra inicialmente no estado de energia mais baixa, isto é alinhado com o campo magnético externo,

³*Exercício:* Mostre que este fato ocorre para um estado inicial genérico. Qual é o efeito da precessão de spin na análise do experimento de Stern-Gerlach?

e então aplicaremos um campo magnético perpendicular ao original o qual oscila com frequência ω . Mostraremos que a probabilidade do estado do sistema passar para o estado de energia mais alta é maximizada para $\omega \propto g_P$, o que nos permite a determinação deste parâmetro. Mais ainda, várias aplicações como relógio atômico e tomografia por ressonância magnética nuclear estão baseadas no conteúdo desta seção.

Consideremos um próton cujo momento de dipolo magnético é dado por

$$\mathbf{m} = g_p \frac{e\hbar}{2M_p c} \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \equiv g_p \mu_P \frac{\mathbf{S}}{\hbar}. \quad (11.29)$$

Consideremos que este próton está na presença do campo magnético

$$\mathbf{B} = B_T \cos(\omega t)\mathbf{i} - B_T \sin(\omega t)\mathbf{j} + B_L \mathbf{k}. \quad (11.30)$$

De (11.20), temos que a equação de movimento para o spin deste próton é dada então por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{g_P \mu_P}{2} \begin{pmatrix} B_L & B_T e^{i\omega t} \\ B_T e^{-i\omega t} & -B_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (11.31)$$

Definindo as frequências

$$\Omega_L = \frac{g_p \mu_p B_L}{2\hbar} \quad \text{e} \quad \Omega_T = \frac{g_p \mu_p B_T}{2\hbar} \quad (11.32)$$

podemos reescrever (11.31) como um par de equações diferenciais acopladas

$$\frac{\partial a}{\partial t} = i (\Omega_T e^{i\omega t} b + \Omega_L a), \quad (11.33)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = i (\Omega_T e^{-i\omega t} a - \Omega_L b).$$

Agora, procuremos soluções de (11.33) da forma

$$a = a_0 e^{i\omega_a t} \quad \text{e} \quad b = b_0 e^{i\omega_b t}, \quad (11.34)$$

onde a_0 , b_0 , ω_a e ω_b são constantes. Substituindo este *ansatz* em (11.33) temos que

$$\begin{pmatrix} (\omega_a - \Omega_L) & -\Omega_T e^{-i\varphi t} \\ -\Omega_T e^{-i\varphi t} & (\omega_b + \Omega_L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (11.35)$$

onde $\varphi = \omega_a - \omega_b - \omega$. Tendo em vista que supusemos que a_0 e b_0 são constantes, devemos ter que $\varphi = 0$, isto é

$$\omega_a = \omega_b + \omega . \quad (11.36)$$

Mais ainda, para que obtenhamos uma solução não trivial o determinante da matriz em (11.35) deve anular-se, o que nos conduz a

$$\omega_a = \frac{\omega}{2} \pm \bar{\omega} \quad \text{e} \quad \omega_b = -\frac{\omega}{2} \pm \bar{\omega} , \quad (11.37)$$

com

$$\bar{\omega}^2 = \left(\Omega_L - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_T^2 . \quad (11.38)$$

Agora podemos escrever a solução geral de (11.31)

$$a(t) = a_1 e^{i(\frac{\omega}{2} - \bar{\omega})t} + a_2 e^{i(\frac{\omega}{2} + \bar{\omega})t} , \quad (11.39)$$

$$b(t) = b_1 e^{-i(\frac{\omega}{2} + \bar{\omega})t} + b_2 e^{-i(\frac{\omega}{2} - \bar{\omega})t} . \quad (11.40)$$

Para especificarmos completamente o problema assumiremos que o sistema encontra-se no instante $t = 0$ no estado de energia mais baixa, a saber, $a(0) = 1$ e $b(0) = 0$. Utilizando estas condições iniciais, bem como (11.33) para obter as derivadas em $t = 0$, segue que

$$a(t) = \left[i \left(-\frac{\omega}{2} + \Omega_L \right) + \bar{\omega} \cotan(\bar{\omega}t) \right] \frac{\sin(\bar{\omega}t)}{\bar{\omega}} e^{i\frac{\omega}{2}t} , \quad (11.41)$$

$$b(t) = -\frac{\Omega_T}{\bar{\omega}} \sin(\bar{\omega}t) e^{-i\frac{\omega}{2}t} . \quad (11.42)$$

Logo a probabilidade de transição para o estado de energia mais alta é dada por

$$|b(t)|^2 = \frac{\Omega_T^2}{\left(\Omega_L - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_T^2} \sin^2(\bar{\omega}t) . \quad (11.43)$$

Note que esta probabilidade é máxima para $\omega_{\text{res}} = 2\Omega_L$, i.e. para

$$\omega_{\text{res}} = \frac{g_p \mu_p B_L}{\hbar} . \quad (11.44)$$

Mais ainda, para aplicar este cálculo para elétrons trocamos os parâmetros do próton pelos do elétron. Com isso é fácil ver que a frequência de ressonância dos elétrons é muito diferente da do próton, permitindo assim a separação dos efeitos devidos aos prótons e aos elétrons.

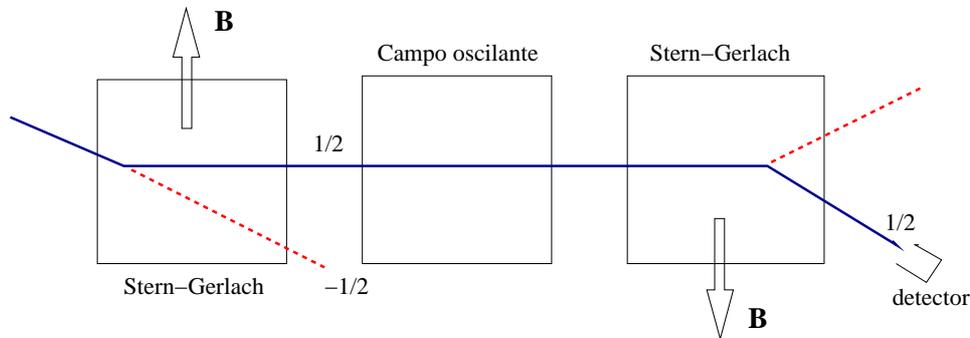


Figura 11.3: Esquema do experimento de Rabi.

Experimento de Rabi

O experimento de Rabi⁴ consiste de dois aparatos de Stern-Gerlach com campos magnéticos opostos separados por uma região contendo um campo estático e um oscilante como em (11.30); vide a figura 11.3. Na ausência do campo oscilante o feixe gerado com autovalor $\hbar/2$ de S_z no primeiro aparato de Stern-Gerlach é detectado integralmente após o segundo desses aparatos. Quando o campo oscilante é ligado o número de átomos detectados é menor, sendo que o número de átomos que chegam ao detector depende da frequência do campo oscilante. Quando esta frequência é a de ressonância dada por (11.44) o número de átomos detectados é mínimo. Isso permite-nos medir com precisão ω_{res} , e conseqüentemente g_p ; vide a figura 11.4.

11.3 Funções de onda incluindo spin

Na descrição que fizemos nos capítulos anteriores dos elétrons ignoramos por completo o fato destes possuírem spin $1/2$. A fim de incluir o grau de liberdade extra associado ao momento angular intrínseco, devemos notar que os operadores de spin (\mathbf{S}^2 e S_z) comutam tanto com \mathbf{x} , bem como com \mathbf{p} e \mathbf{L} . Isto significa que \mathbf{S}^2 e S_z podem ser

⁴Para maiores detalhes vide, Rabi XXXX.

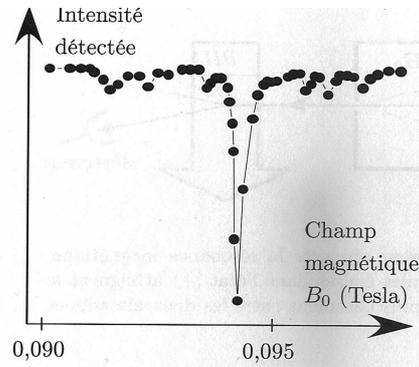


Figura 11.4: Número de átomos detectados em função do frequência do campo magnético B_L num experimento de Rabi. O campo transversal utilizado foi $B_T = 10^{-4}$ T e $\omega = 4$ MHz.

diagonalizados simultaneamente com qualquer um destes operadores.

Por simplicidade, consideremos uma partícula livre de spin 1/2 cuja hamiltoniana é dada por $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}$. Neste caso H comuta com os operadores de spin e podemos diagonalizar simultaneamente⁵ H , \mathbf{P} , \mathbf{S}^2 e S_z . Logo, escrevemos

$$H \phi_{\mathbf{k}sm_s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \phi_{\mathbf{k}sm_s}, \quad (11.45)$$

$$\mathbf{P} \phi_{\mathbf{k}sm_s} = \hbar \mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}sm_s}, \quad (11.46)$$

$$\mathbf{S}^2 \phi_{\mathbf{k}sm_s} = \hbar^2 s(s+1) \phi_{\mathbf{k}sm_s}, \quad (11.47)$$

$$S_z \phi_{\mathbf{k}sm_s} = \hbar m_s \phi_{\mathbf{k}sm_s}. \quad (11.48)$$

A partir destas equações é fácil notar que os estados $\phi_{\mathbf{k}sm_s}$ podem ser escritos como uma função das coordenadas vezes uma parte devida ao

⁵Cuidado! Nem sempre os operadores de spin comutam com a hamiltoniana do sistema. Por exemplo, forças nucleares exibem termos dependentes do spin.

spin. Mais explicitamente, estes estados são

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} &\times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} &\times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Note que o número de estados foi duplicado em relação a uma partícula sem spin. Na verdade, este é um fato geral: se a hamiltoniana de um sistema de partículas de spin s comuta com os operadores de spin, então a degenerescência dos estados é multiplicada por $2s + 1$. Por exemplo para um átomo de hidrogênio, a degenerescência do nível n passa de n^2 para $2n^2$ devido ao fato do elétron ter spin $1/2$.

Um outro ponto interessante a respeito das soluções acima é que o estado do sistema passou a ser dado por uma matriz coluna

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (11.49)$$

cujos elementos são funções da posição.

Uma vez que modificamos o estado do sistema devemos redefinir o produto escalar associado ao espaço vetorial dos estados. Tendo em vista as propriedades exigidas do produto escalar e a forma dos estados é natural definir

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Phi \rangle &\equiv \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger \Phi, \\ &= \int d^3\mathbf{x} (\Psi_1^*(\mathbf{x}) \quad \Psi_2^*(\mathbf{x})) \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{x}) \\ \Phi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (11.50) \\ &= \int d^3\mathbf{x} (\Psi_1^*(\mathbf{x})\Phi_1(\mathbf{x}) + \Psi_2^*(\mathbf{x})\Phi_2(\mathbf{x})), \end{aligned}$$

onde \dagger denota a operação de obter o hermitiano conjugado da matriz, *i.e.* tomar o complexo conjugado e transpor⁶. É interessante notar que para estados que são o produto de uma função de spin por uma função

⁶*Exercício:* Mostre que esta definição de produto escalar obedece a todas as propriedades esperadas.

onda, o produto escalar é obtido multiplicando-se o produto escalar da função de onda pelo produto escalar de spin⁷.

O significado probabilístico dos estados (11.49) também deve ser redefinido: Agora a densidade de probabilidade do elétron estar em \mathbf{x} é dada por $|\Psi_1(\mathbf{x})|^2 + |\Psi_2(\mathbf{x})|^2$. Por outro lado, a probabilidade do elétron ter $m_s = 1/2$ ($-1/2$) é dada por $\int d^3\mathbf{x} |\Psi_{1(2)}(\mathbf{x})|^2$.

11.4 Composição de momentos angulares

Usualmente somos levados a tratar sistemas cujo momento angular total é a soma de diversas contribuições. Por exemplo, átomos com muitos elétrons ou uma partícula com spin. Vamos agora estudar a adição de momento angular em Mecânica Quântica.

Consideremos um sistema cujo momento angular total é dado pela soma de duas parcelas

$$\mathbf{J} = {}_1\mathbf{L} + {}_2\mathbf{L} , \quad (11.51)$$

onde ${}_1\mathbf{L}$ e ${}_2\mathbf{L}$ obedecem à álgebra de momento angular (11.7). Mais ainda, ${}_1\mathbf{L}$ e ${}_2\mathbf{L}$ comutam já que estes operadores referem-se a partículas diferentes ou ao spin e ao momento angular orbital de uma mesma partícula.

O operador \mathbf{J} , que descreve a soma de dois momentos angulares, também satisfaz a álgebra de momento angular

$$[\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\mathbf{J}_k , \quad (11.52)$$

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_j] = 0 , \quad (11.53)$$

com

$$\mathbf{J}^2 \equiv ({}_1\mathbf{L} + {}_2\mathbf{L})^2 = ({}_1\mathbf{L})^2 + ({}_2\mathbf{L})^2 + 2{}_1\mathbf{L} \cdot {}_2\mathbf{L} , \quad (11.54)$$

onde utilizamos que $[{}_1\mathbf{L} , {}_2\mathbf{L}] = 0$.

Para prosseguir devemos verificar quais operadores podem ser diagonalizados simultaneamente. Portanto, devemos obter as relações de comutação entre os operadores ${}_1\mathbf{L}$, ${}_2\mathbf{L}$ e \mathbf{J} . É fácil demonstrar que as

⁷Exercício: Mostre este fato.

seguintes relações são satisfeitas⁸

$$[\mathbf{J}_{i, 1(2)} \mathbf{L}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk} {}_{1(2)}\mathbf{L}_k, \quad (11.55)$$

$$[\mathbf{J}^2, {}_{1(2)}\mathbf{L}_i] = i2\hbar\epsilon^{lik} {}_{2(1)}\mathbf{L}_l {}_{1(2)}\mathbf{L}_k, \quad (11.56)$$

$$[\mathbf{J}_{i, 1(2)} \mathbf{L}^2] = 0, \quad (11.57)$$

$$[\mathbf{J}^2, {}_{1(2)}\mathbf{L}^2] = 0. \quad (11.58)$$

Estas relações implicam que \mathbf{J}^2 não pode ser diagonalizado simultaneamente com a componente z de ${}_1\mathbf{L}$ ou ${}_2\mathbf{L}$. É tradicional diagonalizar $({}_1\mathbf{L}^2, {}_1\mathbf{L}_z, {}_2\mathbf{L}^2, {}_2\mathbf{L}_z)$ ou o conjunto $(\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_z, {}_1\mathbf{L}^2, {}_2\mathbf{L}^2)$. No primeiro caso chamamos a base gerada pelos autovetores de base desacoplada, enquanto no segundo chamamos de base acoplada. Estudemos com maior detalhe estas duas bases, bem como a relação entre elas.

11.4.1 Base desacoplada

Esta escolha é mais simples, no sentido que a obtenção dos autoestados é trivial uma vez que já conhecemos os autovetores e autovalores de ${}_{1(2)}\mathbf{L}^2$ e ${}_{1(2)}\mathbf{L}_z$. De fato, o problema de autovalores que define essa base é

$${}_1\mathbf{L}^2 \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \hbar^2 l_1(l_1 + 1) \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2}, \quad (11.59)$$

$${}_1\mathbf{L}_z \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \hbar m_1 \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2}, \quad (11.60)$$

$${}_2\mathbf{L}^2 \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \hbar^2 l_2(l_2 + 1) \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2}, \quad (11.61)$$

$${}_2\mathbf{L}_z \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \hbar m_2 \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2}, \quad (11.62)$$

cuja solução é

$$\Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \varphi_{l_1 m_1} \times \varphi_{l_2 m_2}, \quad (11.63)$$

onde $\varphi_{l_i m_i}$ são os autoestados conhecidos de ${}_i\mathbf{L}^2$ e ${}_i\mathbf{L}_z$ ($i = 1, 2$). Por exemplo, se ${}_1\mathbf{L}$ é o momento angular orbital de um elétron no átomo

⁸*Exercício:* Demonstre estas relações.

de hidrogênio e ${}_2\mathbf{L}$ é seu spin, então a base desacoplada é dada por

$$\Phi_{l\frac{1}{2}m\frac{1}{2}} = Y_{lm}(\theta, \phi) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.64)$$

$$\Phi_{l\frac{1}{2}m-\frac{1}{2}} = Y_{lm}(\theta, \phi) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.65)$$

Ou ainda, se ${}_{1(2)}\mathbf{L}$ forem os momentos angulares orbitais dos elétrons num átomo de hélio, então

$$\Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) \times Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2), \quad (11.66)$$

onde $(\theta_{1(2)}, \phi_{1(2)})$ são as coordenadas angulares dos elétrons.

Apesar de sua simplicidade de obtenção, a base desacoplada possui o grave defeito de não ser autoestado de \mathbf{J}^2 ! Logo, em muitas aplicações devemos trabalhar com a base acoplada.

11.4.2 Base acoplada

Podemos também escolher diagonalizar simultaneamente os operadores $(\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_z, {}_1\mathbf{L}^2, {}_2\mathbf{L}^2)$, *i.e.*

$$\mathbf{J}^2 \Phi_{j m l_1 l_2} = \hbar^2 j(j+1) \Phi_{j m l_1 l_2}, \quad (11.67)$$

$$\mathbf{J}_z \Phi_{j m l_1 l_2} = \hbar m \Phi_{j m l_1 l_2}, \quad (11.68)$$

$${}_1\mathbf{L}^2 \Phi_{j m l_1 l_2} = \hbar^2 l_1(l_1+1) \Phi_{j m l_1 l_2}, \quad (11.69)$$

$${}_2\mathbf{L}^2 \Phi_{j m l_1 l_2} = \hbar^2 l_2(l_2+1) \Phi_{j m l_1 l_2}. \quad (11.70)$$

Este conjunto de equações define os estados $\Phi_{j m l_1 l_2}$, *i.e.* podemos em princípio resolver estas equações. Todavia, é mais simples e geral obter estes estados como combinações lineares dos vetores da base desacoplada. Isto é possível pois estes dois conjuntos de vetores (acoplados e desacoplados) formam bases do mesmo espaço vetorial e conseqüentemente um pode ser expresso como combinação linear do outro. Logo, podemos escrever, sem perda de generalidade, que

$$\Phi_{j m l_1 l_2} = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2} \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2}. \quad (11.71)$$

Note que esta soma é apenas sobre m_1 e m_2 já que l_1 e l_2 estão fixos pois as duas bases são formadas de autovetores de ${}_{1(2)}\mathbf{L}^2$. Mais ainda, sabemos que

$$C_{m_1 m_2} = \langle \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} | \Phi_{j m l_1 l_2} \rangle . \quad (11.72)$$

Os coeficientes $C_{m_1 m_2}$ da expansão (11.71) são chamados de coeficientes de Clebsch–Gordan. Apesar de não estar explicitado, os coeficientes $C_{m_1 m_2}$ dependem de j , m , l_1 e l_2 .

Nosso objetivo agora é mostrar que a relação (11.71) pode ser usada para determinar quais os possíveis valores que j pode assumir. Posteriormente, mostraremos um método para o cálculo dos coeficientes de Clebsch–Gordan.

Relação fundamental

Em primeiro lugar devemos notar que a soma sobre m_1 e m_2 em (11.71) não é arbitrária, sendo que ela deve satisfazer ao vínculo $m_1 + m_2 = m$. De fato, consideremos o elemento de matriz

$$\langle \Phi_{j m l_1 l_2} | \mathbf{J}_z | \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} \rangle = \hbar(m_1 + m_2) \langle \Phi_{j m l_1 l_2} | \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} \rangle \quad (11.73)$$

$$= \hbar m \langle \Phi_{j m l_1 l_2} | \Phi_{l_1 l_2 m_1 m_2} \rangle . \quad (11.74)$$

A primeira igualdade é obtida escrevendo que $\mathbf{J}_z = {}_1\mathbf{L}_z + {}_2\mathbf{L}_z$, enquanto que a segunda decorre do fato de \mathbf{J}_z ser hermitiano e de $\Phi_{j m l_1 l_2}$ ser seu autovetor. Logo, podemos inferir que $C_{m_1 m_2}$ é não nulo somente se

$$m = m_1 + m_2 . \quad (11.75)$$

Exemplo

Neste ponto é instrutivo verificar quais são os possíveis valores que m pode assumir, bem como sua degenerescência, para o caso da soma de dois momentos angulares com $l = 1$. Utilizando (11.75) podemos obter a tabela 11.1 abaixo.

A partir desta tabela podemos verificar os seguintes fatos (gerais):

- O maior m possível não é degenerado.
- O segundo maior valor de m é duplamente degenerado.

m_1	m_2	m
1	1	2
1	0	1
0	1	1
1	-1	0
0	0	0
-1	1	0
0	-1	-1
-1	0	-1
-1	-1	-2

Tabela 11.1: Valores possíveis de m e sua multiplicidade no caso da adição de dois momentos angulares com $l = 1$

- A degenerescência de m aumenta em passos de 1 até atingir um valor máximo, então vindo a diminuir.

Neste exemplo é fácil ver que os valores possíveis de j são 2, 1 e 0. De fato, o maior j deve ser 2 já que temos um estado com $m = 2$. Retirados os 5 estados com $j = 2$, sobram 4 possibilidades com valor máximo de m igual a 1. Logo, temos $j = 1$, o qual explica três dos estados, restando apenas um estado com $m = 0$ associado a $j = 0$. O fato de j variar em passos de 1 é um fato geral que o leitor deve verificar utilizando as observações (•) acima.

Relação triangular

A partir de (11.75) podemos deduzir que o máximo valor para m é dado por $l_1 + l_2$, o qual corresponde aos máximos valores possíveis para m_1 e m_2 . Uma vez que \mathbf{J}_i obedece à álgebra de momento angular devemos ter que o máximo valor de j é dado por

$$j_{\max} = l_1 + l_2 . \quad (11.76)$$

Mais ainda, a relação (11.75) implica que os possíveis m diferem entre si por inteiros, já que isto ocorre para m_1 e m_2 . Logo, os valores

admissíveis para j devem diferir de j_{\max} por um inteiro.

Para obtermos os valores possíveis de j compatíveis com l_1 e l_2 dados, basta impor que a dimensão do espaço gerado pela base desacoplada seja igual a do espaço gerado pela base acoplada. A partir da base desacoplada sabemos que a dimensão deste espaço é dada por $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Lembrando que para cada valor de j temos $2j + 1$ estados segue que

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1), \quad (11.77)$$

o que nos permite concluir que $j_{\min} = |l_1 - l_2|$. Portanto, temos que

$$|l_1 - l_2| \leq j \leq l_1 + l_2. \quad (11.78)$$

Por exemplo, quando compomos um momento angular com $l_1 = 1$ com um segundo com $l_2 = 3$ podemos obter $j = 2, 3$ e 4 . Ou ainda, a adição de dois spins $1/2$ resulta em $j = 0$ ou $j = 1$.

Coeficientes de Clebsch-Gordan

Vamos agora apenas delinear o procedimento para a obtenção dos coeficientes de mudança da base desacoplada para a acoplada. Via de regra a obtenção dos coeficientes de Clebsch-Gordan é direta mas entediante! Os passos a serem seguidos são os seguintes:

1. Para $j = j_{\max}$ e $m = j_{\max}$ é trivial ver que

$$\Phi_{j_{\max} j_{\max} l_1 l_2} = \Phi_{l_1 l_2 l_1 l_2}, \quad (11.79)$$

pois esta é a única combinação possível.

2. Agora aplicando $\mathbf{J}_- = \mathbf{J}_{-1} + \mathbf{J}_{-2}$ a (11.79) obtemos todos os estados $\Phi_{j_{\max} m l_1 l_2}$ em função da base desacoplada.
3. O próximo passo é obter $\Phi_{j j l_1 l_2}$, onde j é o maior valor de j ainda não determinado. Isto é feito exigindo-se que este estado seja ortogonal a $\Phi_{j' j l_1 l_2}$, com $j' > j$, *i.e.* este estado deve ser ortogonal a todos os estados com o mesmo autovalor de \mathbf{J}_z mas

com autovalores de \mathbf{J}^2 maiores. Além disso exigimos que o estado $\Phi_{j l_1 l_2}$ esteja normalizado⁹.

4. Os estados $\Phi_{j m l_1 l_2}$ com $m < j$ são obtidos usando o operador \mathbf{J}_- , como no segundo passo.
5. Voltamos agora para o terceiro passo até ter obtidos todos os coeficientes.

Para exemplificar este procedimento consideremos a adição de um momento angular orbital $l = 1$ com um spin $1/2$. Denotamos por α e β os autovetores de spin $1/2$ com componente S_z igual a $\hbar/2$ e $-\hbar/2$ respectivamente.

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Para $j = m = 3/2$ temos que

$$\Phi_{\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}} = Y_{11}(\theta, \phi) \alpha . \quad (11.80)$$

- Aplicando \mathbf{J}_- resulta que

$$\begin{aligned} \hbar \sqrt{\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right) \left(\frac{3}{2} - \frac{3}{2} + 1\right)} \Phi_{\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \\ \hbar \sqrt{(1+1)(1-1+1)} Y_{10} \alpha + \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} Y_{11} \beta . \end{aligned}$$

Para obter os estados com $m = -1/2$ e $m = -3/2$ aplicamos \mathbf{J}_- mais duas vezes. Com isso temos que

$$\Phi_{\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{10} \alpha + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{11} \beta , \quad (11.81)$$

$$\Phi_{\frac{3}{2} \frac{-1}{2} \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1-1} \alpha + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{10} \beta , \quad (11.82)$$

$$\Phi_{\frac{3}{2} \frac{-3}{2} \frac{1}{2}} = Y_{1-1} \beta . \quad (11.83)$$

⁹Existe uma fase arbitrária que deve ser fixada.

- Agora escrevemos que

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} = aY_{10}\alpha + bY_{11}\beta, \quad (11.84)$$

e impomos que

$$\langle \Phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} | \Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} \rangle = 0, \quad (11.85)$$

$$\langle \Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} | \Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} \rangle = 1, \quad (11.86)$$

o que nos permite obter a e b .

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{10}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}\beta \quad (11.87)$$

Atuando com \mathbf{J}_- chegamos a

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}1\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1-1}\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{10}\beta \quad (11.88)$$

Exercício

Obtenha a base acoplada para a adição de dois spins $1/2$.

11.5 Apêndice: produto tensorial de espaços vetoriais

Muitos dos resultados deste capítulo podem ser expressos utilizando o produto tensorial de espaços vetoriais. Tendo em vista a sua utilidade, faremos uma rápida revisão das principais propriedades deste produto.

11.5.1 Espaço produto

Consideremos três espaços vetoriais V_1 , V_2 e V . Dizemos que V é o produto tensorial de V_1 por V_2 , denotado por $V_1 \otimes V_2$, se

1. Existir uma função função bilinear

$$\begin{aligned} \otimes \quad V_1 \times V_2 &\rightarrow V \\ |v_1\rangle |v_2\rangle &\rightarrow |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle \quad , \end{aligned}$$

onde $|v_i\rangle \in V_i$ ($i = 1, 2$) e $|v_1\rangle \otimes |v_2\rangle \in V$. Lembre-se que uma função bilinear \otimes deve obedecer a

- (a) $(\alpha|v_1\rangle) \otimes |v_2\rangle = \alpha(|v_1\rangle \otimes |v_2\rangle) = |v_1\rangle \otimes (\alpha|v_2\rangle)$
- (b) $(|u_1\rangle + |v_1\rangle) \otimes |v_2\rangle = |u_1\rangle \otimes |v_2\rangle + |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle$
- (c) $|v_1\rangle \otimes (|u_2\rangle + |v_2\rangle) = |v_1\rangle \otimes |u_2\rangle + |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle$
onde $|u_i\rangle, |v_i\rangle \in V_i$ para $i = 1, 2$ e α é uma constante.

2. Dadas as bases de $\{|u_i\rangle\}$ de V_1 e $\{|v_j\rangle\}$ de V_2 , então o conjunto $\{|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle\}$ é uma base de V .

Exemplo

Consideremos uma partícula de spin $1/2$ movendo-se ao longo de uma reta. O espaço de Hilbert associado ao spin $1/2$ é, conforme vimos, $V_1 = \mathbb{C}$, enquanto que o seu movimento unidimensional está associado ao espaço das funções de quadrado integrável $V_2 = \mathcal{L}$. Por outro lado o espaço de Hilbert associado a este sistema, vide (11.49), é

$$V = \left\{ \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \mid \int dx |\Psi_i(x)|^2 < \infty \right\} \quad (11.89)$$

11.5.2 Vetores de $V_1 \otimes V_2$

Consideremos bases arbitrárias $\{|u_{1(2)}^i\rangle\}$ de $V_{1(2)}$. Dois vetores genéricos $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ pertencentes a V_1 e V_2 , respectivamente, podem ser escritos como

$$|\varphi_1\rangle = \sum_i a_i |u_1^i\rangle \quad \text{e} \quad |\varphi_2\rangle = \sum_j b_j |u_2^j\rangle . \quad (11.90)$$

Logo, o produto tensorial destes vetores é dado por

$$|\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle = \sum_{ij} a_i b_j |u_1^i\rangle \otimes |u_2^j\rangle , \quad (11.91)$$

ou seja, as componente do vetor $|\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$ na base $\{|u_1^i\rangle \otimes |u_2^j\rangle\}$ são $a_i b_j$. Por outro lado, um vetor $|\psi\rangle$ arbitrário de $V_1 \otimes V_2$ pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |u_1^i\rangle \otimes |u_2^j\rangle , \quad (11.92)$$

onde c_{ij} são constantes. Todavia, nem sempre é possível encontrar a_i e b_j tais que $c_{ij} = a_i b_j$, isto é, não são todos os vetores de $V_1 \otimes V_2$ que podem ser escritos como o produto tensorial de vetores de V_1 por outro de V_2 .

Exemplo

Considere o espaço vetorial V definido por (11.89).