Capítulo 10

Spin e Adição de Momento Angular

Até este momento consideramos que o estado de um elétron encontra-se completamente especificado pela sua função de onda $\Psi(\mathbf{x})$. Neste capítulo mostraremos que o elétron possui um momento angular intrínsico (*spin*), o qual requer a introdução de um novo grau de liberdade 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.

10.1 Experimento de Stern-Gerlach

Historicamente a primeira evidência para a existência de um momento angular intrísico foi dada por Stern e Gerlach. 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 conpreendermos este experimento devemos saber como uma partícula comporta-se na presença de um campo magnético externo.

10.1.1 Momento de dipolo magnético

Vamos agora obter a relação 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

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int d^3\mathbf{x}\ \mathbf{x} \wedge \mathbf{J}(\mathbf{x}) \ . \tag{10.1}$$

A densidade de corrente elétrica de uma partícula pontual é

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = q\mathbf{v}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \ , \tag{10.2}$$

onde q é a carga elétrica da partícula, $\mathbf{x}_p$ sua posição e $\mathbf{v}$ sua velocidade. Logo, utilizando (10.1) e (10.2) temos que o momento de dipolo magnético de uma partícula satisfaz

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2c}\mathbf{x}_p \wedge \mathbf{v} = \frac{q}{2\mu c}\mathbf{L} \ , \tag{10.3}$$

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

$$\mathbf{m} = -\frac{e\hbar}{2\mu c}\frac{\mathbf{L}}{\hbar} \ , \tag{10.4}$$

onde podemos verificar o aparecimento do magneton de Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} = 9,2732 \times 10^{-21} \mathrm{erg/gauss} \ . \tag{10.5}$$

Um fato interessante sobre esta relação 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.

10.1.2 Descrição do experimento

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

Assumindo que as dimensões caraterísticas 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 observados[1]. A interação entre o campo magnético e o momento de dipolo magnético do sistema dá origem a uma força

[1] *Exercício:* Explique o porquê de não podermos realizar este experimento com feixes de elétrons livres.

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \nabla(\mathbf{m}\cdot\mathbf{B}) \;, \\ &= \nabla(m_z B_z) \simeq m_z \nabla B_z \;, \\ &= \frac{q}{2\mu c} L_z \nabla B_z \;. \end{aligned} \tag{10.6}$$

Classicamente, a componente z do momento angular do sistema pode ser qualquer e consequente m_z e $\mathbf{F}$ também. Logo, deveríamos observar átomos em todos os pontos do anteparo como mostra a figura (a) abaixo. 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. Consequentemente, devemos observar apenas algumas linhas no anteparo, as quais correspondem a átomos com valores diferentes de L_z.

Num experimento com átomos de alumínio, Stern e Gerlach observaram apenas duas linhas no anteparo (vide figura (b) acima). 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 intrínsico, o qual é semi-inteiro e dado por 1/2.[2]

Este fato surpreendente cai como uma luva para a teoria do momento angular que desenvolvemos no capítulo 7, 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 associar este novo grau de liberdade do sistema a operadores hermitianos S_i, os quais obedecem a

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}S_k \ . \tag{10.7}$$

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.

10.1.3 Origem do spin

Dado que o elétron exibe um momento angular intrísico, 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 liberade, o qual está associado ao spin. Esta novidade não pode ser expliacada 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 intrísico de uma partícula pode ser inteiro ou semi-inteiro, dependo da partícula considerada.

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

Por exemplo, elétrons, prótons e neutrons possuem spin (momento angular intrísico) 1/2, enquanto que os pions (π^0, $\pi^{\pm}$) 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^{++}.

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

10.2 Spin 1/2

A análise das consequências de termos operadores que satisfazem as relações de comutação (10.7) já foi estudada anteriormente, e o que nos resta fazer é obter uma representação explícita dos operadores S_i para spin 1/2. Neste caso sabemos que podemos diagonalizar $\mathbf{S}^2$ e S_z simultaneamente, e que temos dois estados com o mesmo valor para o autovalor de $\mathbf{S}^2$ ($s = 1/2$) cujos autovalores de S_z são distintos ($m_s = \pm 1/2$).

$$\mathbf{S}^2 \varphi_{\frac{1}{2}m_s} = \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) \varphi_{\frac{1}{2}m_s} \tag{10.8}$$

$$S_z \varphi_{\frac{1}{2}m_s} = \hbar m_s \varphi_{\frac{1}{2}m_s} \tag{10.9}$$

Logo somos naturalmente levados a considerar o espaço vetorial cujos elementos são matrizes coluna da forma $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Todavia nós também já estudamos sistemas com apenas dois estados! Observando o que foi feito anteriormente para sistemas de dois níveis podemos perceber que uma representação para os S_i é dada por

$$S_1 = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{10.10}$$

$$S_2 = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tag{10.11}$$

$$S_3 = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{10.12}$$

onde esta pode ser verificada através da substituição em (10.7).

Portanto, todo o tratamento de sistema de dois níveis pode ser aplicado diretamente a sistemas envolvendo partículas com spin 1/2! Por exemplo, nesta representação para os S_i temos que os estados do sistema são dados por

$$\varphi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \qquad (10.13)$$

$$\varphi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \qquad (10.14)$$

Mais ainda, todo a estrutura desenvolvida previamente para a evolução temporal de sistemas de dois níveis pode ser também utilizada. Visando explicitar este fato passemos agora a análise de alguns exemplos.

10.2.1 Momento magnético intrínsico

Vimos anteriormente que existe um momento de dipolo magnético associado ao momento angular orbital de partículas carregadas através de (10.3). Analogamente, existe um momento de dipolo magnético associado ao spin. Assumiremos que estes são proporcionais, como em (10.3),

$$\mathbf{m} = g\frac{q}{2\mu c}\mathbf{S} , \qquad (10.15)$$

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

$$\mathbf{m} = -\frac{g}{2}\ \mu_B\vec{\sigma} , \qquad (10.16)$$

onde a constante μ_B é dada por (10.5). O valor de g para o elétron é a quantidade medida com maior precisão em Física, sendo o seu valor numérico

$$g = 2 \times (1,001159652193 \pm 0,000000000010) . \qquad (10.17)$$

No caso de prótons e neutrons, que também são partículas de spin 1/2, temos que (10.16) continua válida com a óbvia troca da massa do elétron pela massa do nucleon em (10.5). No caso do próton $g_P = 2,79$, enquanto que para o neutron $g_N = -1,91$. Intuitivamente, é natural suporque g_N seja nulo já que carga elétrica do neutron é nula. O fato de g_N ser diferente de zero indica que o neutron é um objeto composto cujos constituintes possuem carga elétrica não nula.

10.2.2 Precessão do spin num campo magnético

Usualmente o spin manifesta-se através de sua interação com um campo magnético. Por esta razão vamos discutir rapidamente a precessão que o spin de um elétron 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

$$H = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \tag{10.18}$$

onde usamos (10.16) e tomamos $g = 2$. A equação de Schrödinger dependente do tempo escreve-se como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} , \tag{10.19}$$

onde o estado do sistema é

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

A nossa experiência 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 (10.18) são dados por

$$E_+ = \mu_B B \iff u_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \tag{10.20}$$

$$E_- = -\mu_B B \iff u_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \tag{10.21}$$

Escrevendo o estado inicial em função de $u_\pm$

$$\Psi(0) = \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix} = \alpha(0)u_+ + \beta(0)u_- \tag{10.22}$$

a solução deste problema de valor inicial é dada por

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \alpha(0)u_+ e^{-iE_+t/\hbar} + \beta(0)u_- e^{-iE_-t/\hbar} \; . \tag{10.23}$$

Para vislumbrarmos o significado físico de (10.23) consideremos um sistema cujo estado inicial seja autovetor de σ_x com autovalor $+1$. Neste caso $\alpha(0) = \beta(0) = 1/\sqrt{2}$ e consequentemente

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t/2} \\ e^{i\Omega t/2} \end{pmatrix} \; , \tag{10.24}$$

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

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \Omega t \tag{10.25}$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \Omega t \tag{10.26}$$

$$\langle S_z \rangle = 0 \tag{10.27}$$

Destas expressões podemos ver claramente que o valor esperado do spin esta precessando ao redor do eixo determinado pelo campo magnético[3]. Note que este é o mesmo comportamento previsto pela Mecânica Clássica para um dipolo magnético sob a ação de uma campo magnético $\mathbf{B}$, o qual dá origem a um torque $\mathbf{m} \wedge \mathbf{B}$.

10.2.3 Ressonância Magnética

Veja o livro de R. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics* parágrafo 11.9 na página 519 (em anexo).

[3] *Exercício:* Mostre que este fato ocorre para um estado inicial genérico.

10.3 Funções de onda incluindo spin

Na descrição que fizemos nos capítulos anteriores dos elétrons ignoramos por completo o fato destes possuirem spin 1/2. A fim de incluir o grau de liberdade extra associado ao momento angular intrínsico, 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 diagonalizados simultaneamente com qualquer um destes operadores.

Consideremos uma partícula de spin 1/2 cuja Hamiltoniana é dada por $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{x})$. Neste caso H comuta com os operadores de spin e podemos diagonalizar simultaneamente H, $\mathbf{S}^2$ e S_z. Por simplicidade, consideremos uma partícula livre ($V = 0$), para a qual escrevemos

$$H\phi_{ksm_s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\phi_{ksm_s} \, , \tag{10.28}$$

$$\mathbf{S}^2\phi_{ksm_s} = \hbar^2 s(s+1)\phi_{ksm_s} \, , \tag{10.29}$$

$$S_z\phi_{ksm_s} = \hbar m_s \phi_{ksm_s} \, . \tag{10.30}$$

A partir destas equações é fácil notar que os estados ϕ_{ksm_s} podem ser escritos como uma função das coordenadas vezes uma parte devida ao spin. Mais explicitamente, estes estados são

$$\begin{array}{cc} e^{ikx} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \, , \\ e^{ikx} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \, , \\ e^{-ikx} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \, , \\ e^{-ikx} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \, . \end{array}$$

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, o fato do elétron ter spin $1/2$ implica que a degenerescência do nível n passa de n^2 para $2n^2$.

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

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} , \qquad (10.31)$$

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 propridades exigidas do produto escalar e a forma dos estados é natural definir

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Phi\rangle &\equiv \int d^3\mathbf{x}\ \Psi^\dagger\Phi \\ &= \int d^3\mathbf{x}\ \left(\Psi_1^*(\mathbf{x}) \quad \Psi_2^*(\mathbf{x})\right) \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{x}) \\ \Phi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \qquad (10.32) \\ &= \int d^3\mathbf{x}\ \left(\Psi_1^*(\mathbf{x})\Phi_1(\mathbf{x}) + \Psi_2^*(\mathbf{x})\Phi_2(\mathbf{x})\right) \end{aligned}$$

onde $\dagger$ denota a operação de obter o hermitiano conjugado da matriz, *i.e.* tomar o complexo comjugado e transpor[4]. É interessante notar que para estados que são o produto de uma função de spin por uma função onda, o produto escalar é obtido multiplicando-se o produto escalar da função de onda pelo produto escalar de spin[5].

O significado probabilítico dos estados (10.31) também deve ser redefinido: Agora a densidade de probabilidade do elétron estar em $\mathbf{x}$ é dada por $|\Psi_1(\mathbf{x})|^2 + |\Psi_2(\mathbf{x})|^2$. A probabilidade do elétron ter $m_s = 1/2$ $(-1/2)$ é dada por $\int d^3\mathbf{x}\ |\Psi_{1(2)}(\mathbf{x})|^2$.

10.4 Composição de momentos angulares

Usualmente somos levados a tratar sistemas cujo momento angular total é a soma de diversas contribuições. Por exemplo, um átomo com muitos

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

[5] *Exercício:* Mostre este fato.

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

$$\mathbf{J} = {}_1\mathbf{L} + {}_2\mathbf{L} \ , \tag{10.33}$$

onde ${}_1\mathbf{L}$ e ${}_2\mathbf{L}$ obedecem a álgebra de momento angular (10.7). 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

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] &= i\hbar\epsilon^{ijk}\mathbf{J}_k \ , && (10.34)\\ \left[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_j\right] &= 0 \ , && (10.35) \end{aligned}$$

com

$$\mathbf{J}^2 \equiv ({}_1\mathbf{L} + {}_2\mathbf{L})^2 = ({}_1\mathbf{L})^2 + ({}_2\mathbf{L})^2 + 2{}_1\mathbf{L} \cdot {}_2\mathbf{L} \ , \tag{10.36}$$

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 seguintes relações são satisfeitas[6]

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{J}_i, {}_{1(2)}\mathbf{L}_j\right] &= i\hbar\epsilon^{ijk} \ {}_{1(2)}\mathbf{L}_k \ , && (10.37)\\ \left[\mathbf{J}^2, {}_{1(2)}\mathbf{L}_i\right] &= i2\hbar\epsilon^{lik} \ {}_{2(1)}\mathbf{L}_l \ {}_{1(2)}\mathbf{L}_k \ , && (10.38)\\ \left[\mathbf{J}_i, {}_{1(2)}\mathbf{L}^2\right] &= 0 \ , && (10.39)\\ \left[\mathbf{J}^2, {}_{1(2)}\mathbf{L}^2\right] &= 0 \ . && (10.40) \end{aligned}$$

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

[6] *Exercício:* Demonstre estas relações.

primeiro caso chamamos a base gerada pelos autovetores de base desacoplada, enquanto no segundo chamamos de base acoplada. Estudemos com maior detalhes estas duas bases, bem como a relação entre elas.

10.4.1 Base desacoplada

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

$$
\begin{aligned}
{}_1\mathbf{L}^2\Phi_{l_1l_2m_1m_2} &= \hbar^2 l_1(l_1+1)\Phi_{l_1l_2m_1m_2} \,, && (10.41)\\
{}_1\mathbf{L}_z\Phi_{l_1l_2m_1m_2} &= \hbar m_1\Phi_{l_1l_2m_1m_2} \,, && (10.42)\\
{}_2\mathbf{L}^2\Phi_{l_1l_2m_1m_2} &= \hbar^2 l_2(l_2+1)\Phi_{l_1l_2m_1m_2} \,, && (10.43)\\
{}_2\mathbf{L}_z\Phi_{l_1l_2m_1m_2} &= \hbar m_2\Phi_{l_1l_2m_1m_2} \,, && (10.44)
\end{aligned}
$$

cuja solução é

$$\Phi_{l_1l_2m_1m_2} = \varphi_{l_1m_1} \times \varphi_{l_2m_2} \,, \qquad (10.45)$$

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

$$
\begin{aligned}
\Phi_{l\frac{1}{2}m\frac{1}{2}} &= Y_{lm}(\theta,\phi) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \,, && (10.46)\\
\Phi_{l\frac{1}{2}m\frac{-1}{2}} &= Y_{lm}(\theta,\phi) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \,. && (10.47)
\end{aligned}
$$

Ou ainda, se ${}_{1(2)}\mathbf{L}$ forem os momentos angulares orbitais dos elétrons no átomo de hélio então

$$\Phi_{l_1l_2m_1m_2} = Y_{l_1m_1}(\theta_1,\phi_1) \times Y_{l_2m_2}(\theta_2,\phi_2) \,, \qquad (10.48)$$

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.

10.4.2 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.* procuraremos estados os quais satisfaçam

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^2\Phi_{jml_1l_2} &= \hbar^2 j(j+1)\Phi_{jml_1l_2} \,, & (10.49)\\
\mathbf{J}_z\Phi_{jml_1l_2} &= \hbar m\Phi_{jml_1l_2} \,, & (10.50)\\
{}_1\mathbf{L}^2\Phi_{jml_1l_2} &= \hbar^2 l_1(l_1+1)\Phi_{jml_1l_2} \,, & (10.51)\\
{}_2\mathbf{L}^2\Phi_{jml_1l_2} &= \hbar^2 l_2(l_2+1)\Phi_{jml_1l_2} \,. & (10.52)
\end{aligned}$$

Este conjunto de equações define os estados $\Phi_{jml_1l_2}$, *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 dasacoplados) formam bases do mesmo espaço vetorial e consequentemente um pode ser expresso como combinação linear do outro. Logo podemos escrever sem perda de generalidade que

$$\Phi_{jml_1l_2} = \sum_{m_1m_2} C_{m_1m_2}\Phi_{l_1l_2m_1m_2} \,. \tag{10.53}$$

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 autovetores de ${}_{1(2)}\mathbf{L}^2$. Mais ainda, sabemos que

$$C_{m_1m_2} = \langle \Phi_{l_1l_2m_1m_2} | \Phi_{jml_1l_2} \rangle \,. \tag{10.54}$$

Os coeficientes $C_{m_1m_2}$ da expansão (10.53) são chamados de coeficientes de Clebsch-Gordan.

Nosso objetivo agora será mostrar que a relação (10.53) 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 (10.53) não é arbitrária, sendo que ela deve satisfazer ao vínculo $m_1 + m_2 = m$. De fato, consideremos o elemento de matriz

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{jml_1l_2}|\mathbf{J}_z|\Phi_{l_1l_2m_1m_2}\rangle &= \\ &= \hbar(m_1+m_2)\langle\Phi_{jml_1l_2}|\Phi_{l_1l_2m_1m_2}\rangle & (10.55)\\ &= \hbar m\langle\Phi_{jml_1l_2}|\Phi_{l_1l_2m_1m_2}\rangle\ . & (10.56)\end{aligned}$$

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 $\Phi_{jml_1l_2}$ ser seu autovetor. Logo podemos inferir que $C_{m_1m_2}$ é não nulo somente se

$$m = m_1 + m_2\ . \tag{10.57}$$

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 (10.57) podemos obter a tabela abaixo.

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

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.
- 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 possíveis valores de j são 2, 1 e 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 (10.57) 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 a álgebra de momento angular devemos ter que o máximo valor de j é dado por

$$j_{\max} = l_1 + l_2 \ . \tag{10.58}$$

Mais ainda, a relação (10.57) 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

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \ , \tag{10.59}$$

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

$$|l_1 - l_2| \leq j \leq l_1 + l_2 \ . \tag{10.60}$$

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:

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

$$\Phi_{j_{\max} j_{\max} l_1 l_2} = \Phi_{l_1 l_2 l_1 l_2} \ . \tag{10.61}$$

• Agora aplicando $\mathbf{J}_- = {}_1\mathbf{L}_- + {}_2\mathbf{L}_-$ a (10.61) obtemos todos os estados $\Phi_{j_{\max} m l_1 l_2}$ em função da base desacoplada.

• O próximo passo é obter $\Phi_{jjl_1l_2}$, onde j é o maior valor de j ainda não determinado. Isto é feito exigindo-se que este estado seja ortogonal a $\Phi_{j'jl_1l_2}$, 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 $\Phi_{jjl_1l_2}$ esteja normalizado[7].

• Os estados $\Phi_{jml_1l_2}$ com $m < j$ são obtidos usando o operador $\mathbf{J}_-$, como no segundo passo.

• 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 $1/2$[8].

• Para $j = m = 3/2$ temos que

$$\Phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}1\frac{1}{2}} = Y_{11}(\theta, \phi)\alpha \ . \tag{10.62}$$

• Aplicando $\mathbf{J}_-$ resulta que

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

Aplicando $\mathbf{J}_-$ mais duas vezes obtemos que

$$\Phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{11}\beta \ , \tag{10.63}$$

[7]Existe uma fase arbitrária que deve ser fixada.

[8]Denotamos por α e β os autovetores de spin $1/2$ com componente S_z igual a $\hbar/2$ e $-\hbar/2$ respectivamente.

$$\Phi_{\frac{3}{2}\frac{-1}{2}1\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}\beta \ , \tag{10.64}$$

$$\Phi_{\frac{3}{2}\frac{-3}{2}1\frac{1}{2}} = Y_{1-1}\beta \ . \tag{10.65}$$

- Agora escrevemos que

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} = aY_{10}\alpha + bY_{11}\beta \ , \tag{10.66}$$

e impomos que

$$\langle\Phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}}|\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}}\rangle = 0 \ , \tag{10.67}$$

$$\langle\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}}|\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}}\rangle = 1 \ , \tag{10.68}$$

o que nos permite obter a e b.

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}1\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{10}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}\beta \tag{10.69}$$

Atuando com $\mathbf{J}_-$ chegamos a

$$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}1\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1-1}\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{10}\beta \tag{10.70}$$

Exercício

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