

2. Simetrias e valores conserváveis em mecânica quântica

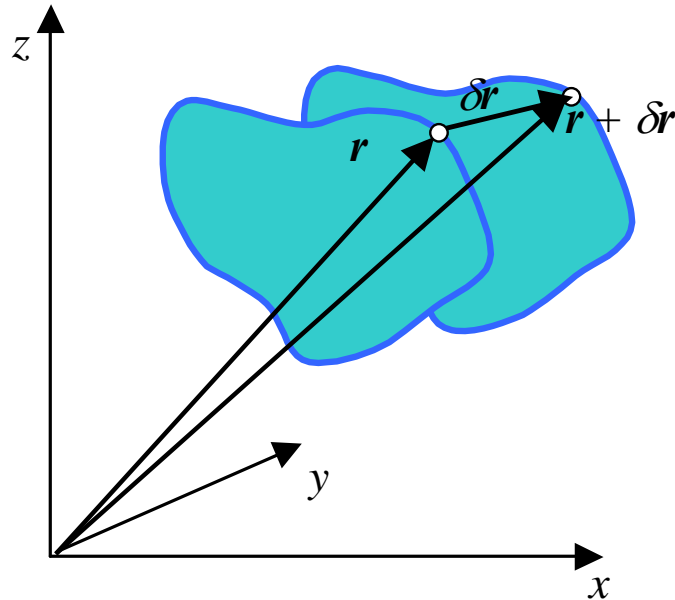
Simetria com respeito as trocas das partículas idênticas é só um exemplo do princípio geral:

Invariância de Hamiltoniano com respeito a qualquer *transformação* do sistema implica existência dum certo *valor conservável* relativo a esta transformação (ou *grupo* das transformações).

Esta afirmação provenha do chamado teorema de Noether (1916), obtido pela Emi Noether primeiro em teoria algébrica dos grupos e depois aplicado à mecânica clássica. Sua generalização para mecânica quântica foi feita pelo E. Wigner e J. von Neumann.

Conhecidos exemplos: translações e rotações de espaço 3-dimensional.

Grupo das translações do espaço



Translação *infinitesimal* de cada vector r por mesmo valor δr : $r \rightarrow r' = r + \delta r$, produz a transformação correspondente de cada função de onda de várias partículas:

$$\begin{aligned}\psi(r_1, r_2, \dots) &\rightarrow \psi(r_1', r_2', \dots) = \\ &= \psi(r_1 + \delta r, r_2 + \delta r, \dots) = \\ &= \psi(r_1, r_2, \dots) + \delta r \cdot \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \psi(r_1, r_2, \dots).\end{aligned}$$

(até ordem linear em δr).

Esta mesma transformação pode ser apresentada como acção do *operador de transformação* sobre a função ψ :

$$\hat{T}_{\delta r} \psi = \left(1 + \delta r \cdot \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \right) \psi$$

Invariância de Hamiltoniano significa a sua comutação com este operador: $[\hat{H}, \hat{T}_{\delta t}] = 0$, para o que é relevante só a comutação:

$$\left[\hat{H}, \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \right] = 0$$

Isso implica a conservação do *impulso total*:

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha}$$

Reparamos também que comutação do \hat{H} consigo corresponde a conservação de *energia total* e está relacionada com invariância com respeito à translação temporal: $t \rightarrow t' = t + \delta t$.

Grupo das rotações do espaço

Aparte de *homogeneidade* do espaço, a sua propriedade importante é a *isotropia* (a equivalência das todas direcções). Isso implica invariância dos sistemas físicos com respeito ao *grupo das rotações* (ou grupo $SO(3)$, grupo das matrizes unimodulares e ortogonais de 3ª ordem). Uma rotação infinitesimal $\delta\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{n}\delta\varphi$ (por ângulo $\delta\varphi$ em torno de eixo \mathbf{n}) produz o deslocamento de cada vector \mathbf{r} :

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r},$$

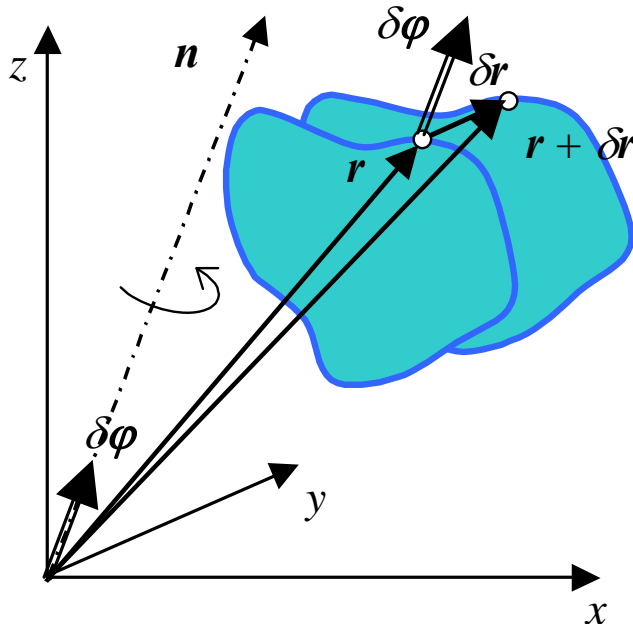
e, seguidamente, a transformação das funções de onda:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) &\rightarrow \psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_2, \dots) \\ &= \psi(\mathbf{r}_1 + \delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_2, \dots) \\ &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha} (\delta\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{r}_{\alpha}) \nabla_{\alpha} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots),$$

apresentada pelo *operador de rotação*:

$$\hat{R}_{\delta\boldsymbol{\varphi}} \psi = \left(1 + \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \nabla_{\alpha} \right) \psi$$



Invariância de Hamiltoniano com respeito a rotação: $[\hat{H}, \hat{R}_{\delta\varphi}] = 0$,
 implica conservação do *momento cinético total*:

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \nabla_{\alpha} = \hbar \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{l}}_{\alpha}$$

Regras de comutação entre operadores $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$, e $\hat{\mathbf{l}}$ resultam da acção
 explícita de ∇ sobre coordenadas:

$$[\hat{l}_i, \hat{x}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{x}_k, \quad [\hat{l}_i, \hat{p}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{p}_k, \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{l}_k,$$

com o tensor unitário antissimétrico ϵ_{ijk} ($\epsilon_{123} = 1$, $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{ikj}$, etc.).
 Daqui seguem as relações de comutação para momento cinético total:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hat{L}_y, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hat{L}_x$$

A conclusão daqui é que *não podem* ser medidas três componentes de \hat{L} simultaneamente. Mas desde o facto que o operador

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

comuta com todas estas três componentes:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

resulta que pode ser medido simultaneamente com qualquer uma delas.

A escolha habitual é caracterizar os estados estacionários por valores

$$\begin{array}{ccc} \text{de } \hat{L}^2 & \text{e} & \text{de } \hat{L}_z \\ \downarrow & & \downarrow \\ L(L+1) & \text{e} & M = -L, -L+1, \dots, L, \end{array}$$

onde L é *momento cinético total* com valores possíveis $L = 0, 1, 2, \dots$

O resultado anterior pode ser obtido por construção explícita das autofunções dos operadores \hat{l}_z e \hat{l}^2 em coordenadas esféricas:

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \hat{l}^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$$

ou das relações de comutação.

Autofunções de momento cinético

Desde formas explícitas dos operadores \hat{l}_z e \hat{l}^2 encontram-se as suas funções próprias, caracterizadas pelos índices l e m :

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\theta)$$

chamadas *harmónicos esféricos*, onde os factores Φ_m e Θ_{lm} são:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad \Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \quad (\text{para } m \geq 0)$$

Também $\Theta_{l,-|m|} = (-1)^m \Theta_{l,|m|}$ para $m < 0$, sendo P_l^m os polinómios adjuntos de Legendre:

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \text{sen}^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

As transformações das funções $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sob rotações, efectuadas com operadores $\hat{l}_{x,y,z}$, realizam uma *representação irredutível* $D^{(l)}$ do grupo $SO(3)$, relacionada a momento total l :

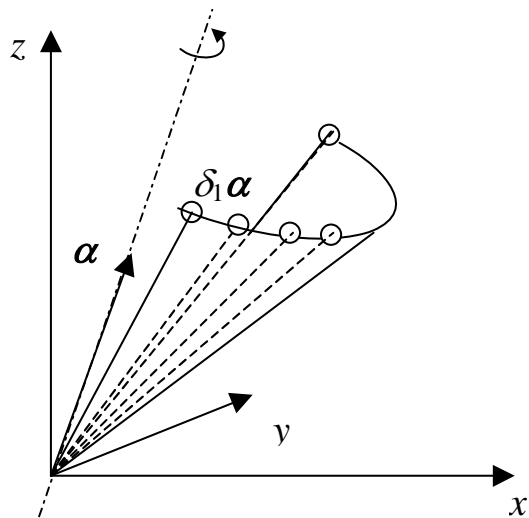
$$\hat{R}_\alpha Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} D_{mm'}^{(l)}(\alpha) Y_{lm'}(\theta, \varphi)$$

onde as funções $D_{mm'}^{(l)}(\alpha)$ (os elementos de certa matriz $D^{(l)}(\alpha) \in D^{(l)}$) chamam-se as *funções de Wigner*. Assim, a representação $D^{(l)}$ é um conjunto de matrizes numéricas que correspondem univocamente aos operadores $\hat{l}_{x,y,z}$, mas actuam só na base dos estados com momento total l .

A irreducibilidade significa que nenhuma das matrizes nesta base pode ser apresentada em forma dos blocos independentes.

$$\hat{D}^{(l)}(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{matrix} \leftarrow 2l+1 \rightarrow \\ \left[\begin{array}{c} \text{bloco azul} \end{array} \right] \\ \updownarrow 2l+1 \end{matrix} \neq \begin{pmatrix} \text{bloco azul} & 0 \\ 0 & \text{bloco azul} \end{pmatrix}$$

No caso particular $l = 0$, existe só uma função $Y_{00} = 1$, correspondente a representação *escalar* $D^{(0)}$ com todas $D^{(0)}(\boldsymbol{\alpha}) = 1$ (matriz de ordem 1). Para $l = 1$ temos 3 funções $Y_{1,1}$, $Y_{1,0}$, $Y_{1,-1}$, formando base de representação *vectorial* (matrizes de ordem 3), etc. Mas existem também as representações de SO(3) das ordens pares: 2, 4,



Uma rotação finita $\hat{R}_{\boldsymbol{\alpha}}$ pode ser vista como limite de uma seqüência das rotações infinitesimais $\delta\boldsymbol{\alpha}$:

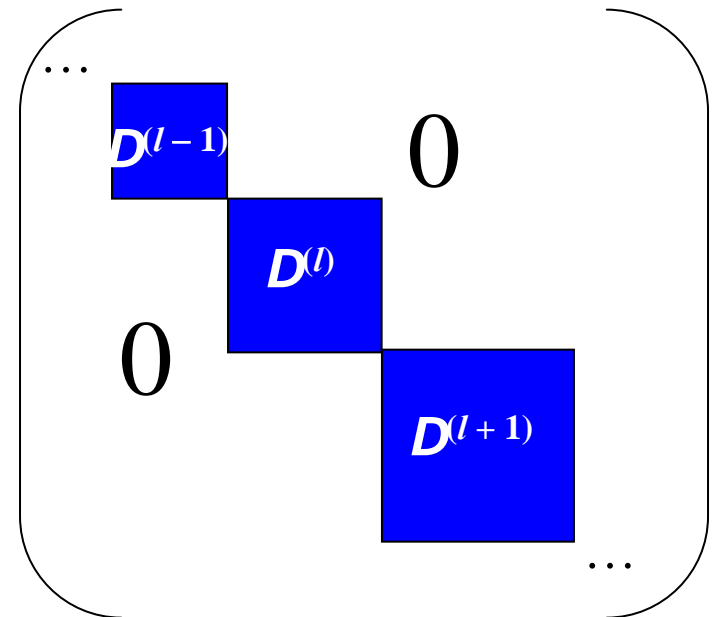
$$\hat{R}_{\boldsymbol{\alpha}} = \lim_{N \rightarrow \infty, \sum_i \delta_i = 1} \left(1 + i\delta_1 \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) \left(1 + i\delta_2 \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) \dots \dots \left(1 + i\delta_N \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) = \exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}),$$

Logo as funções de Wigner podem ser interpretadas como os elementos de matriz deste operador:

$$D_{m'm}^{(l)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle l, m' | \exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}) | l, m \rangle$$

e as matrizes resultam unitárias:

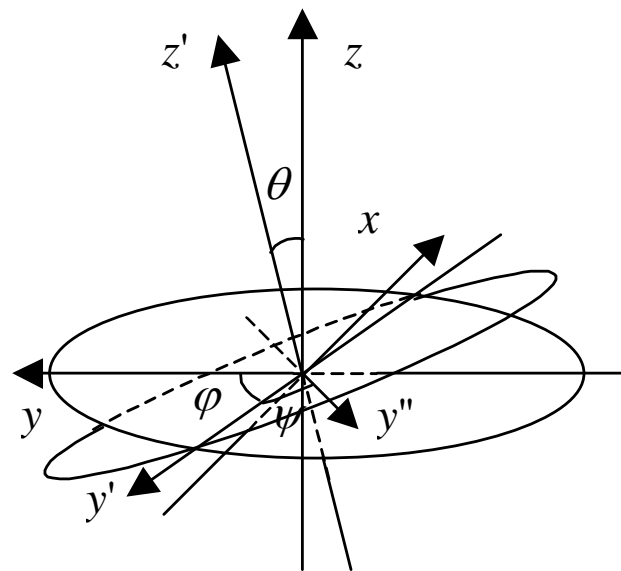
$D_{mm'}^{(l)}(\boldsymbol{\alpha}) = D_{m'm}^{(l)*}(-\boldsymbol{\alpha})$. O conjunto das todas representações irreduzíveis $D^{(l)}$ com índices l crescentes forma uma estrutura dos blocos independentes no espaço dos estados classificados segundo valores de momento angular total.



Ângulos de Euler

Uma representação ajeitada para as rotações arbitrárias foi sugerida pelo Leonard Euler ainda no sec. XVIII, considerando problemas de mecânica clássica (como movimento dos peões) e mecânica celestial (movimento das planetas). Segundo esquema de Euler, qualquer rotação caracterizada por vector de ângulo $\psi = \psi (\text{sen}\theta \cos\varphi, \text{sen}\theta \text{sen}\varphi, \cos\theta)$ pode apresentar-se como seqüência das três rotações consecutivas:

- 1) por ângulo φ (ângulo de *precessão*) ao redor do eixo z do sistema inicial de coordenadas,
- 2) por ângulo θ (ângulo de *nutação*) ao redor do eixo y' do sistema obtido com 1), e por fim
- 3) por ângulo ψ (ângulo de *rotação*) ao redor do eixo z' do sistema obtido com 2).



Então, pelo princípio de composição das operações de grupo, o operador apresenta-se como o produto:

$$\hat{R}_\psi = \exp(i\psi\hat{L}_{z'})\exp(i\theta\hat{L}_{y'})\exp(i\phi\hat{L}_z)$$

Mas os mesmos operadores de momento angular transformam-se sob rotações como

$$\begin{aligned}\hat{L}_{y'} &= \exp(i\phi\hat{L}_z)\hat{L}_y\exp(-i\phi\hat{L}_z), \\ \exp(i\theta\hat{L}_{y'}) &= \exp(i\phi\hat{L}_z)\exp(i\theta\hat{L}_y)\exp(-i\phi\hat{L}_z), \\ \exp(i\psi\hat{L}_{z'}) &= \exp(i\theta\hat{L}_{y'})\exp(i\psi\hat{L}_z)\exp(-i\theta\hat{L}_{y'}).\end{aligned}$$

Substituindo consecutivamente estes resultados na equação anterior chegamos a expressão de operador \hat{R}_ψ através das componentes de momento angular no sistema inicial:

$$\hat{R}_\psi = \exp(i\phi\hat{L}_z)\exp(i\theta\hat{L}_y)\exp(i\psi\hat{L}_z)$$

rotações de spin

Spin de uma partícula quântica (e^- , p , n , ν , etc.) define-se como o seu momento cinético *interno* s que para todas partículas indicadas só obteve valores (com respeito ao certo eixo z) iguais a $\pm\hbar/2$.



As componentes cartesianas \hat{s}_i de operador correspondente \hat{s} obrigam as mesmas regras de comutação (até o factor de normalização):

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k$$

que as para operadores de momento cinético comum \hat{l} .

Usando a base de autoestados de operador :

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad \hat{s}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

representamos todos através das matrizes de Pauli, (Cap. 1):

$$\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i$$

com as propriedades:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_i^2 &= 1, & \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} &= 0, \quad j \neq i, \\ \text{ou: } \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j &= \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \end{aligned}$$

Logo se construi também o operador escalar:

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = 3\hbar^2/4 = \hbar^2 s(s+1).$$

Uma rotação de espaço \hat{R}_α transforma as coordenadas segundo:

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}})\mathbf{r}$$

em particular, a rotação infinitesimal dum versor:

$$\mathbf{e}_i \rightarrow \mathbf{e}'_i = \mathbf{e}_i + \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{e}_i$$

produz a transformação das componentes \hat{s}_i de $\hat{\mathbf{s}}$:

$$\hat{\mathbf{s}} = \sum_i s_i \hat{\mathbf{e}}_i \rightarrow \sum_i \hat{s}_i \mathbf{e}'_i = \sum_i \hat{s}'_i \mathbf{e}_i, \quad \text{ou}$$

$$\hat{s}'_i = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_i + \varepsilon_{ijk} \delta\alpha_j \hat{\sigma}_k) = \hat{s}_i + \frac{\delta\alpha_j}{i\hbar} [\hat{s}_i, \hat{s}_j] = \hat{s}_i + \frac{1}{i\hbar} [\hat{s}_i, \delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{s}}].$$

Isso significa que o operador $\hat{\mathbf{s}}$ transforma-se sob rotações finitas como:

$$\hat{\mathbf{s}}' = \exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{s}}/\hbar) \hat{\mathbf{s}} \exp(-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{s}}/\hbar)$$

e comparando esta lei com a para r concluímos que \hat{s} tem o mesmo papel para variáveis de spin que \hat{L} para variáveis espaciais.

Também em analogia com as rotações comuns construímos as funções de Wigner:

$$D_{\sigma'\sigma}^{(1/2)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle \sigma' | \exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}_z) | \sigma \rangle$$

correspondentes à *representação spinor* $D^{(1/2)}$ do grupo $S\hat{O}(3)$. Com uso dos ângulos de Euler a forma explícita duma matriz $D^{(1/2)}(\boldsymbol{\alpha}) \in D^{(1/2)}$ obteve-se como:

$$D_{\sigma'\sigma}^{(1/2)}(\varphi, \theta, \psi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi+\psi}{2}} & \text{sen} \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi-\psi}{2}} \\ -\text{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi-\psi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi+\psi}{2}} \end{pmatrix}$$

De modo análogo constroem-se outras representações das ordens semi-inteiras (das dimensões pares).

Relação entre momento cinético orbital e spin. Momento angular total.

Geralmente, as funções de onda estão caracterizadas tanto pelas variáveis orbitais como as de spin. Por exemplo, para 1 partícula temos o simples produto (Cap. 1):

$$\psi(\mathbf{r}, s) = \varphi(\mathbf{r})\chi(s)$$

Transformação rotacional por ângulo α aplica-se à função orbital $\varphi(\mathbf{r})$ através de operador $\exp(i\alpha \cdot \hat{\mathbf{L}})$ e à função de spin $\chi(s)$ através de operador $\exp(i\alpha \cdot \hat{\mathbf{S}})$, sendo $\hat{\mathbf{S}} = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i$ o operador de *spin total* (em analogia com o momento cinético total). Mas os operadores $\hat{\mathbf{L}}$ e $\hat{\mathbf{S}}$ são independentes, portanto $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ e a sua acção junta sobre $\psi(\mathbf{r}, s)$ resulta em:

$$e^{i\alpha \cdot \hat{\mathbf{L}}} e^{i\alpha \cdot \hat{\mathbf{S}}/\hbar} \psi(\mathbf{r}, s) = e^{i\alpha \cdot (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})/\hbar} \psi(\mathbf{r}, s)$$

O operador $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ se chama *momento angular total*, ele produz o operador geral das rotações para o sistema composto:

$$\hat{R}_\alpha = \exp(i\alpha \cdot \hat{\mathbf{J}})$$

Adição dos momentos angulares.

Considerando operadores:

$$\hat{L} = \sum_i \hat{l}_i, \quad \hat{S} = \sum_i \hat{s}_i, \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

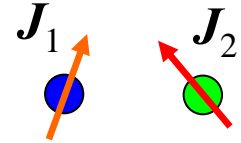
temos em conta que *só duas* componentes de cada deles são simultaneamente medíveis, em concordância com as relações canônicas de comutação:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad \text{etc.}$$

Por isso os autoestados de momento total *não podem* ser simultaneamente os autoestados dos momentos constituintes, mas apresentam-se como as suas *combinações lineares*. Estas combinações definem-se pelas regras de adição dos momentos. Consideremos estas regras nos casos mais simples.

Adição de 2 momentos

Pelo facto de que os operadores \hat{J}_1 e \hat{J}_2 actuam sobre variáveis diferentes e portanto são independentes:



$$\left[\hat{J}_1, \hat{J}_2 \right] = 0 \quad (\text{para todas componentes cartesianas}),$$

podemos medir simultaneamente os valores J_1^2 , J_2^2 , J_{1z} , J_{2z} e definir os autoestados correspondentes:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

com as propriedades:

$$J_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle,$$

$$J_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = m_1 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle, \quad \text{etc.},$$

que formam um sistema completo dos estados.

Considerando o momento total:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$$

temos obviamente $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$, e portanto os valores J e M relacionados com este par podem servir como bons números quânticos para classificação dum sistema completo dos autoestados (ficando os valores $j_{1,2}$ bem definidos porque também $[\hat{J}^2, \hat{J}_{1,2}^2] = 0$). Contudo temos:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_{1z}] = 2i(\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y} - \hat{J}_{2x}\hat{J}_{1y}) \neq 0$$

e, de modo semelhante, $[\hat{J}^2, \hat{J}_{2z}] \neq 0$, portanto m_1 e m_2 não são definidos para este sistema. Assim cada elemento de um sistema pode ser geralmente expresso através dos de outro sistema:

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ (m_1 + m_2 = M)}} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \quad (\text{E})$$

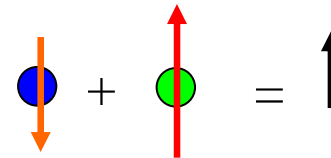
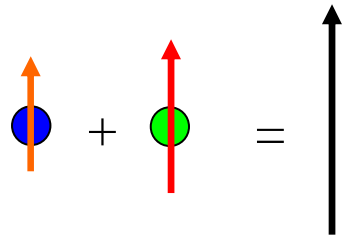
com os *coeficientes de Clebsch-Gordan* (c. C.-G.).

O número dos termos nesta soma depende de relação entre M e J
 (sendo o valor J limitado entre

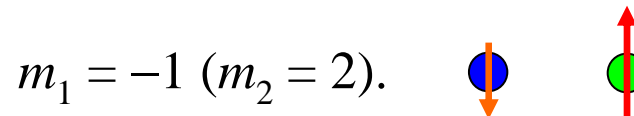
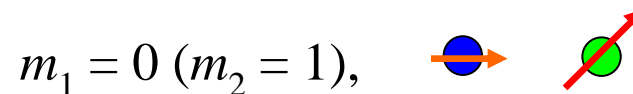
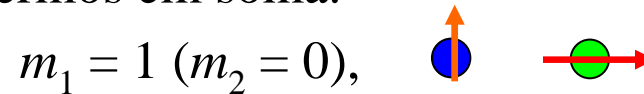
o máximo de $j_1 + j_2$

e

o mínimo de $|j_1 - j_2|$).



Exemplo: $j_1 = 1, j_2 = 2$. Escolhemos $J = 2$ (entre $j_1 + j_2 = 3$ e $|j_1 - j_2| = 1$) e $M = 1$. Neste caso temos 3 termos em soma:



Expansão inversa:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{J, M} \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle |j_1, j_2, J, M\rangle \quad (\text{E}')$$

multiplicada por $\langle j_1, j_2, m_1', m_2' |$ produz na parte de esquerda o produto dos símbolos de Kronecker (por ortogonalidade dos estados) e na parte de direita o produto dos “vectors” dos c. C.-G.:

$$\delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2, m_2'} = \sum_{J, M} \langle j_1, j_2, m_1', m_2' | j_1, j_2, J, M \rangle \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle \quad (\text{O})$$

a relação de ortogonalidade para c. C.-G.

De modo semelhante, multiplicando a expansão directa por $\langle j_1, j_2, J', M' |$, obtemos outra relação:

$$\delta_{J, J'} \delta_{M, M'} = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J', M' \rangle \quad (\text{O}')$$

As relações (O) para o caso $m_1 = m'_1$, $m_2 = m'_2$, e (O') para $J = J'$, $M = M'$, lêem-se:

$$\sum_{J,M} \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle^2 = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle^2 = 1 \quad (\text{N})$$

expressando a normalização dos c. C.-G.

Relações recursivas para c. C.-G

Consideramos o elemento de matriz do operador J_+ (ou J_-) entre estados $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ e $|j_1, j_2, J, M\rangle$. Actuando para direita, o operador sobe (baixa) o índice M por 1:

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | J_{\pm} | j_1, j_2, J, M \rangle &= \\ &= \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \pm 1 \rangle. \quad (\text{D}) \end{aligned}$$

Doutro lado, acção de $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ para esquerda produz a baixada dos índices alternativos $m_{1,2}$ (quando J_- os sobe):

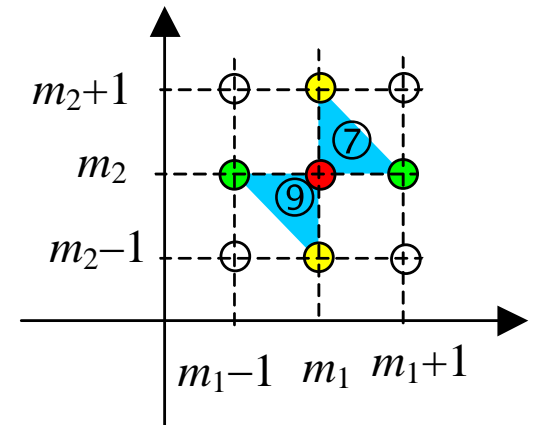
$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | J_{\pm} | j_1, j_2, J, M \rangle = \\ = \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle + \\ + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j_1, j_2, J, M \rangle. \end{aligned} \quad (D')$$

Comparação das partes de direita em (D) e (D') leva as *relações recursivas* para c. C.-G.:

$$\sqrt{J(J + 1) - M(M \pm 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \pm 1 \rangle \quad (R)$$

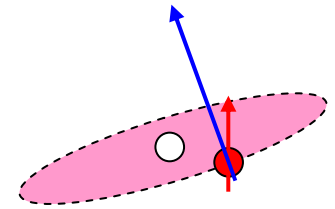
$$\begin{aligned} = \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle \\ + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j_1, j_2, J, M \rangle. \end{aligned}$$

apresentadas simbolicamente no esquema (com sinais superiores ou inferiores) pelos triângulos (com índices ⑨ ou ⑦).



As condições de ortogonalidade e normalização, Eqs. (O,O',N), junto com as relações recursivas, (R), permitem cálculo directo dos todos c. C.-G.

Exemplo: $j_1 = 1/2, j_2 = l$. Neste caso J só pode ter 2 valores: $l \pm 1/2$. Para $J = l + 1/2$ temos único termo na Eq. (E) com $M = l + 1/2, m_1 = 1/2, m_2 = l$, e desde Eq. (N) para este caso resulta:



$$\left\langle \frac{1}{2}, l, \frac{1}{2}, l \left| \frac{1}{2}, l, l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = 1$$

o que define o primeiro c. C.-G. Logo Eq. (R) para o triângulo ⑦, com os vértices , $\langle 1/2, l, 1/2, l | 1/2, l, l + 1/2, l + 1/2 \rangle$, $\langle 1/2, l, -1/2, l | 1/2, l, l + 1/2, l - 1/2 \rangle$ e $\langle 1/2, l, -1/2, l | 1/2, l, l + 1/2, l + 1/2 \rangle = 0$, junta com o resultado acima leva a:

$$\left\langle \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}, l \left| \frac{1}{2}, l, l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, \right\rangle = \sqrt{\frac{(l+1/2)(l+3/2) - (l-1/2)(l+1/2)}{l(l+1) - l(l-1)}} = \sqrt{\frac{l+1/2}{l}}, \quad \text{o seguinte c. C.-G.}$$

Logo, aplicação da Eq. (R) para Eq. (D) permite obter:

$$\left\langle \frac{1}{2}, l, \frac{1}{2}, l-1 \left| \frac{1}{2}, l, l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle, \text{etc.}$$

Finalmente, pode recuperar-se toda a serie

$$\left\langle \frac{1}{2}, l, \mp \frac{1}{2}, M \pm \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, l, l + \frac{1}{2}, M \right\rangle$$

até $M = -l - \frac{1}{2}$ (que de facto vão repetir-se para M negativos).

De maneira evidente, a esquema anterior generaliza-se para o caso de j_1, j_2 arbitrários. No entanto na prática todos os coeficientes de Clebsch-Gordan encontram-se habitualmente nas tabelas.

Operadores vectores e regras de selectividade

As grandezas dinâmicas podem ser vectores (como, por exemplo impulso \mathbf{p}), tendo os correspondentes operadores vectores. Um operador vector \hat{A} transforma-se sob a rotação \hat{R}_φ de modo que cada seu elemento de matriz $A_{ij} = \langle \psi_i | \hat{R}_\varphi | \psi_j \rangle$ apresenta-se como:

$$A_{ij} = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{R}_\varphi^{-1} \hat{A} \hat{R}_\varphi | \psi_j \rangle = \langle \psi'_i | \hat{A}' | \psi'_j \rangle$$

onde

$$\hat{A}' = \hat{R}_\varphi \hat{A} \hat{R}_\varphi^{-1}$$

Particularmente, para uma rotação infinitesimal $\hat{R}_{\delta\psi}$ temos:

$$\hat{A}' = \hat{A} + \delta\psi [\hat{A}, \hat{L}]$$

Para as componentes de \hat{A}' serem expressas a custa das mesmas de \hat{A} , o comutador $[\hat{A}_\alpha, \hat{L}_\beta]$ deve ser a combinação linear das \hat{A}_γ . Em analogia com os casos simples de $\hat{A} = \hat{r}$, $\hat{A} = \hat{p}$ as relações gerais de comutação entre um operador vector e o de momento angular são:

$$[\hat{A}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma$$

Os elementos de matriz de operador \hat{A} só existem para transições onde:

$$L \rightarrow \begin{cases} L+1, \\ L, \\ L-1, \end{cases}$$

excepto a transição $L = 0 \rightarrow L = 0$ que é estritamente proibida (por \hat{A} não poder deixar invariável o estado escalar).

A acção de \hat{A} sobre índice M está definida pelas regras:

$$\begin{aligned}\hat{A}_+ &= \hat{A}_x + i\hat{A}_y : & M &\rightarrow M + 1, \\ \hat{A}_- &= \hat{A}_x - i\hat{A}_y : & M &\rightarrow M - 1, \\ \hat{A}_z & & M &\rightarrow M,\end{aligned}$$

que amostram outra vez a semelhança com acção dos operadores de 2ª quantificação.

Operadores tensores

Um operador tensor irreduzível de ordem k : $\hat{T}^{(k)}$ tem $2k + 1$ componentes $\hat{T}_q^{(k)}$ com o índice q percorrer os valores $-k \leq q \leq k$ (o que permite trata-lo como o de projecção z de $T^{(k)}$). Sob acção das rotações, as componentes transformam-se segundo a representação irreduzível $D^{(k)}$:

$$\hat{R}_\varphi \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}_\varphi^{-1} = \sum_{q'=-k}^k D_{q'q}^{(k)}(\varphi) \hat{T}_{q'}^{(k)}$$

Os exemplos particulares são os já considerados antes:

$$k = 0, \quad \text{escalar} \quad \hat{R}_\varphi \hat{T}^{(0)} \hat{R}_\varphi^{-1} = \hat{T}^{(0)}$$

$$k = 1, \quad \text{vector} \quad \hat{R}_\varphi \hat{T}_\alpha^{(1)} \hat{R}_\varphi^{-1} = \sum_{\alpha'=1}^3 D_{\alpha'\alpha}^{(1)} \hat{T}_{\alpha'}^{(1)}$$

Relações de comutação entre operadores tensores e os de momento angular são:

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{T}_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{J}_\alpha | k, q \rangle$$

ou, em particular:

$$[\hat{J}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} \quad (\text{T})$$

$$[\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} q' \delta_{qq'} = q \hat{T}_q^{(k)}$$

Verificação das Eqs. (T) permite concluir se um conjunto de $2k + 1$ operadores constitui operador tensor de ordem k .

Teorema de Wigner-Eckart

Um resultado central que determina importância dos operadores tensores está relacionado à estrutura dos seus elementos de matriz entre estados classificados tanto segundo valores de momento angular total j e da sua projecção m como segundo outras variáveis dinâmicas α (relacionadas, por exemplo, ao número electrónico principal, níveis vibratórios, etc.). A representação deste elemento em forma:

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \frac{\langle \alpha', j' | \hat{T}^{(k)} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle k, j, q, m | k, j, j', m' \rangle,$$

elemento de matriz factor geométrico
reduzido

se conhece como o *teorema de Wigner-Eckart*. Antes de passar a sua derivação, analisamos em mais detalhe estrutura das componentes q de um operador tensor.

Para exemplo de um operador vector \hat{A} , verifica-se que as suas componentes tensores estão relacionadas com as cartesianas como:

$$\hat{A}_{q=0} \equiv \hat{A}_z, \quad \hat{A}_{q=1} = -\hat{A}_+ = -\frac{\hat{A}_x + i\hat{A}_y}{\sqrt{2}}, \quad \hat{A}_{q=-1} = \hat{A}_- = \frac{\hat{A}_x - i\hat{A}_y}{\sqrt{2}}.$$

Daqui temos:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{A}_{q=0}] &= [\hat{J}_z, \hat{A}_z] = 0, \\ [\hat{J}_z, \hat{A}_{q=1}] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{J}_z, \hat{A}_x] - \frac{i}{\sqrt{2}} [\hat{J}_z, \hat{A}_y] = -\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{A}_y - \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{A}_x = \hat{A}_{q=1}, \end{aligned}$$

etc., em concordância com expressões gerais, Eqs. (T). Logo, os tensores irreduzíveis de qualquer ordem inteira l podem ser construídos a partir dum operador vector A , segundo a formula:

$$\hat{P}_{l,m} = |\hat{A}|^l Y_{l,m}(\hat{\theta}, \hat{\varphi}),$$

onde $|\hat{A}| = \sqrt{\hat{A}_x^2 + \hat{A}_y^2 + \hat{A}_z^2}$, $\varphi = \arctan \hat{A}_y \hat{A}_x^{-1}$, $\hat{\theta} = \arccos \hat{A}_y |\hat{A}|^{-1}$.

Mas o modo mais prático obter as componentes consecutivas m , começando da mais alta $m = l$, é o seguinte:

$$\hat{P}_{l,l} = c\hat{A}_+^l, \quad \hat{P}_{l,l-1} = [\hat{A}_-, \hat{P}_{l,l}] \quad \text{etc.}$$

sendo c uma constante de normalização. De facto, Eq. (71) apresenta um conjunto dos polinómios homogéneos de ordem l em operadores $\hat{A}_{x,y,z}$. Por quanto o operador $|\hat{A}|$ fica invariante sob rotações, a lei de transformação para $\hat{P}_{m,l}$ resulta desde a para harmónicos esféricos $Y_{l,m}$, em forma:

$$\hat{R}_\alpha \hat{P}_{l,m} \hat{R}_\alpha^{-1} = \sum_{m'=-l}^l D_{mm'}^{(l)}(\alpha) \hat{P}_{l,m'}$$

como deve ser para um operador tensor irreductível.

Exemplo: $l = 2$ (momento quadruplar)

factor de normalização

$$\hat{P}_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \hat{A}_{\pm 1}^2,$$

$$\hat{P}_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (\hat{A}_0 \hat{A}_{\pm 1} + \hat{A}_{\pm 1} \hat{A}_0),$$

$$\hat{P}_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (2\hat{A}_0^2 + \hat{A}_1 \hat{A}_{-1} + \hat{A}_{-1} \hat{A}_1)$$

Para obter operadores tensores irreduzíveis das ordens arbitrárias, se pode implementar a *multiplicação directa* das representações $D^{(j)}$ e $D^{(j')}$: $D^{(j)} \otimes D^{(j')}$ (incluindo $j = 1/2$, ver acima), segundo a formula de descomposição dos produtos das funções Wigner:

$$D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\alpha) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\alpha) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m, m'} \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m' \rangle \times \\ \times \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle D_{m' m}^{(j)}(\alpha).$$

Logo, usando ortogonalidade dos c. C.-G., Eqs. (O,O'), podemos separar daqui qualquer representação $D^{(j)}$, tendo operadores $\hat{T}_m^{(j)}$ como a sua base.

Exemplos:

- 1) $D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)} = D^{(0)} + D^{(1)}$,
 $2 \times 2 = 1 + 3$
- 2) $D^{(1/2)} \otimes D^{(1)} = D^{(1/2)} + D^{(3/2)}$.

Ortogonalidade das funções de Wigner

Desde invariância rotacional de um escalar resultam relações de ortogonalidade para funções Wigner:

$$\int D_{m_1 m_1'}^{(j_1)*}(\alpha) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(\alpha) d\alpha = \frac{\delta_{j_1, j_2} \delta_{m_1, m_2} \delta_{m_1', m_2'}}{2j_1 + 1}$$

onde integral normalizado $\int d\alpha$ entende-se como:

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} d\varphi \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} d\psi$$

segundo os ângulos de Euler θ , φ , ψ e os limites 4π permitem incluir as representações com índices semi-inteiros (neste caso funções $D^{(j)}$ são complexas).

A forma geral das funções Wigner para $\alpha \approx \mathbf{y}$ (correspondente ao ângulo de Euler θ , o resto dos factores sendo simples exponenciais de tipo $e^{im\varphi}$) é:

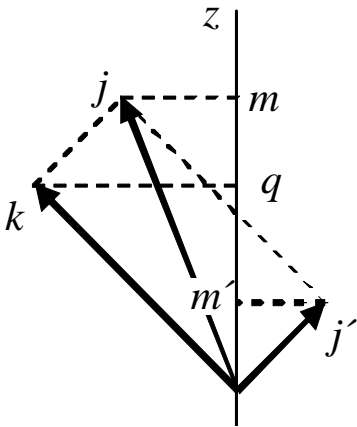
$$D_{mm'}^{(j)}(\theta) = (-1)^{j+m'} \sqrt{\frac{(j+m')!}{(j-m')!(j+m)!(j-m)!}} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{m'-m} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{m'+m} \times \\ \times \left\{ (1-t)^{m-m'} t^{-m-m'} \left(\frac{d}{dt}\right)^{j-m'} \left[t^{j+m} (1-t)^{j-m} \right] \right\}_{t=\cos^2 \theta/2},$$

com a expressão em parêntesis curvada conhecida como um *polinómio de Jacobi*.

Derivação de teorema de Wigner-Eckart

Nos já sabemos que sob rotações o operador $\hat{T}_q^{(k)}$ transforma-se segundo a representação $D^{(k)}$, e o estado $|\alpha, j, m\rangle$ segundo $D^{(j)}$. Mas o seu produto $\hat{T}_q^{(k)} |\alpha, j, m\rangle$ é um elemento de espaço transformado pelo produto directo $D^{(k)} \otimes D^{(j)}$ e por tanto descomponha-se em combinação dos elementos irreduzíveis sujeitos às $D^{(j')}$ com $k + j > j' > |k - j|$. Cada elemento irreduzível denotado $|\tilde{\alpha}, j, m\rangle$ se obteve dos produtos $\hat{T}_q^{(k)} |\alpha, j', m\rangle$ com uso dos c. C.-G.:

$$|\tilde{\alpha}, j, m\rangle = \sum_{q, m'} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha, j', m'\rangle \langle k, j', q, m' | k, j', j, m\rangle$$



Verifiquemos que esta combinação tem a propriedade de transformação adequada a $D^{(j)}$. Aplicando uma rotação, temos:

$$\begin{aligned}
\hat{R}|\tilde{\alpha}, j, m\rangle &= \sum_{q, m'} D_{q'q}^{(k)} \hat{T}_{q'}^{(k)} D_{m''m'}^{(j)} |\alpha, j', m''\rangle \langle k, j', q, m' | k, j', j, m\rangle = \\
&= \sum_{\substack{q, q', \\ m', m''}} \hat{T}_{q'}^{(k)} \sum_{j_1=|k-j'|}^{k+j'} \sum_{m_1, m'_1} \langle k, j', q', m'' | k, j', j_1, m_1\rangle \langle k, j', q, m' | k, j', j_1, m'_1\rangle D_{m_1 m'_1}^{(j_1)} \times \\
&\quad \times \langle k, j', q, m' | k, j', j, m\rangle |\alpha, j', m''\rangle = \text{ortogonalidade dos c. C.-G.} \\
&= \sum_{q', m''} \hat{T}_{q'}^{(k)} \sum_{j_1, m_1, m'_1} \langle k, j', q', m'' | k, j', j_1, m_1\rangle D_{m_1 m'_1}^{(j_1)} |\alpha, j', m''\rangle \delta_{jj_1} \delta_{mm'_1} = \\
&= \sum_{m_1} D_{m_1 m}^{(j)} \sum_{q', m''} \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, j', q', m'' | k, j', j, m_1\rangle |\alpha, j', m''\rangle = \sum_{m_1} D_{m_1 m}^{(j)} |\tilde{\alpha}, j, m_1\rangle,
\end{aligned}$$

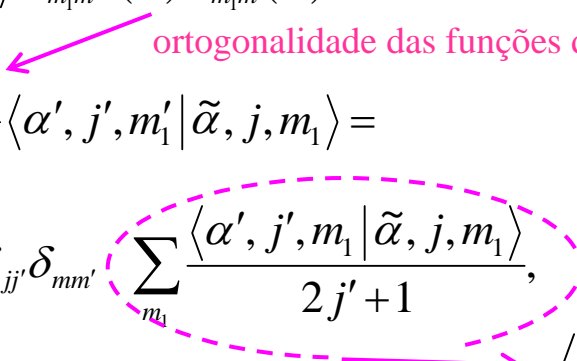
o que corresponde exactamente à lei de transformação de tensor $\hat{P}_{j,m}$.

Agora consideramos o elemento de matriz

$$\langle \alpha', j', m' | \tilde{\alpha}, j, m \rangle$$

o que de facto inclui elementos relacionados com *três* momentos: \mathbf{j}' , \mathbf{j}_1 e \mathbf{k} (os últimos dois resultam em \mathbf{j}). Fazendo o médio segundo todas rotações, no sentido de $\int d\omega$, obtemos:

$$\begin{aligned}
& \int \langle \alpha', j', m' | \hat{R}_\omega^{-1} \hat{R}_\omega | \tilde{\alpha}, j, m \rangle d\omega = \\
& = \sum_{m_1, m'_1} \int \langle \alpha', j', m'_1 | \tilde{\alpha}, j, m_1 \rangle D_{m'_1 m'}^{(j')*}(\omega) D_{m_1 m}^{(j)}(\omega) d\omega = \\
& = \sum_{m_1, m'_1} \frac{\delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{m_1 m'_1}}{2j'+1} \langle \alpha', j', m'_1 | \tilde{\alpha}, j, m_1 \rangle = \\
& = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \left(\sum_{m_1} \frac{\langle \alpha', j', m_1 | \tilde{\alpha}, j, m_1 \rangle}{2j'+1} \right), \tag{A}
\end{aligned}$$




$\frac{\langle \alpha', j' | \hat{T}^{(k)} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j'+1}}$

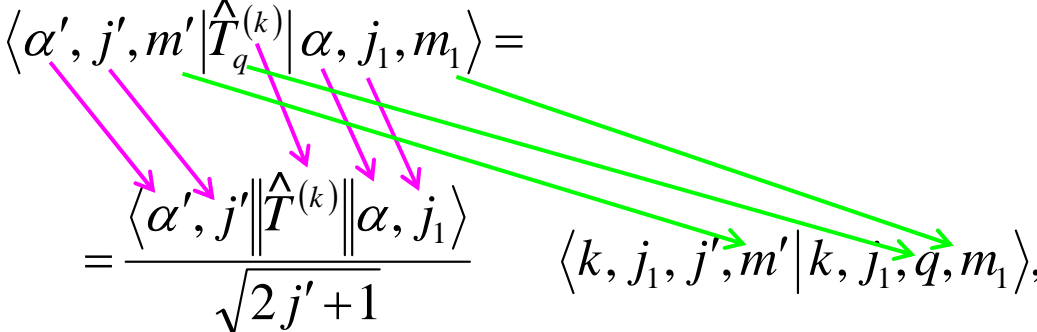
o que deve coincidir com o mesmo valor, porque elemento de matriz não depende de escolha de sistema das coordenadas. Mas, doutro lado, este valor pela definição, escreve-se também como:

$$\langle \alpha', j', m' | \tilde{\alpha}, j, m \rangle = \sum_{q, m_1} \langle \alpha', j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha, j_1, m_1 \rangle \langle k, j_1, q, m_1 | k, j_1, j, m \rangle$$

Logo o elemento de matriz que figura no teorema Wigner-Eckart, se obteve por inversão desta equação, usando ortogonalidade dos c. C.-G.

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha, j_1, m_1 \rangle = \sum_{j, m} \langle \alpha', j', m' | \tilde{\alpha}, j, m \rangle \langle k, j_1, j, m | k, j_1, q, m_1 \rangle$$


e, após de substituir aqui Eq. (A) e somar em j, m usando os símbolos de Kronecker, chegamos mesmo a formulação de teorema de Wigner-Eckart:

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha, j_1, m_1 \rangle &= \\ &= \frac{\langle \alpha', j' || \hat{T}^{(k)} || \alpha, j_1 \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle k, j_1, j', m' | k, j_1, q, m_1 \rangle, \end{aligned}$$


que mostra a separação dos parâmetros dinâmicos (no elemento reduzido) e cinemáticos (no c. C.-G.).

Exemplo: operador vector \hat{J} (corresponde ao $\hat{T}_q^{(1)}$),

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{J}_q | \alpha, j, m \rangle = \frac{\langle \alpha', j' | \hat{\mathbf{J}} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle 1, j, q, m | 1, j, j', m' \rangle.$$

Para $q = 0$ temos $\hat{J}_{q=0} = \hat{J}_z$, e, desde o facto de que $|\alpha, j, m\rangle$ são os seus autoestados, os elementos de matriz são:

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{J}_z | \alpha, j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\alpha\alpha'} m$$

Mas segundo teorema de Wigner-Eckart esta grandeza é igual a:

$$\frac{\langle \alpha', j' | \hat{\mathbf{J}} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle 1, j, 0, m | 1, j, j', m' \rangle$$

e, usando o valor de c. C.-G.:

$$\langle 1, j, 0, m | 1, j, j', m' \rangle = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}$$

podemos definir o elemento reduzido:

$$\frac{\langle \alpha', j' | \hat{J} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j'+1}} = \delta_{jj'} \delta_{\alpha\alpha'} \sqrt{j(j+1)}$$

comporta-se
como $|\mathbf{J}|$

Uma vez obtido o elemento reduzido, logo vale para todos q na expressão do teorema.

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{J}_q | \alpha, j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\alpha\alpha'} \sqrt{j(j+1)} \langle 1, j, q, m | 1, j, j', m' \rangle.$$

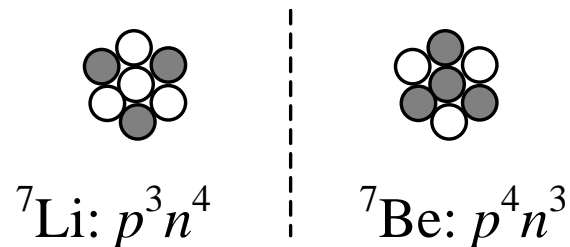
Spin isotópico

As simetrias e valores conserváveis relacionados com os grupos das translações e rotações são de facto só primeiros numa longa lista. Mas noutros casos as transformações iniciais são muito *menos* evidentes, não descritíveis na linguagem clássica.

Assim é a simetria de carga para hadrões, as partículas sujeitas as interacções fortes, que definem as propriedades dos núcleos atómicos. Os exemplos mais importantes desta classe são as duas partículas mais estáveis:

| | | |
|-------------------|------------------------|------------------------|
| nome de partícula | protão ● | neutrão ○ |
| símbolo | p | n |
| carga eléctrica | $+e$ | 0 |
| spin | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| massa | $m_p \approx 1836 m_e$ | $m_n \approx 1838 m_e$ |

Elas são diferentes com respeito as forças electromagneticas mas quase idênticas com respeito as forças nucleares (muito mais fortes). Portanto, em particular, os chamados núcleos de espelho, como:



têm propriedades nucleares (não químicas) muito próximas. Os números de prótons e nêutrons determinam vários isótopos de cada elemento, por isso a invariância deste tipo chama-se também isotópica.

W. Heisenberg (1932) propôs tratar p e n como dois estados de carga de uma mesma partícula, nucleão N , marcados com valores diferentes de nova variável quântica: spin isotópico (ou isospin, (em analogia com spin comum, $s = 1/2$), assim que:

$$I = 1/2, \quad I_z = \begin{cases} 1/2 \rightarrow p, \\ -1/2 \rightarrow n. \end{cases}$$

Reparem que o operador já não corresponde ao grupo $SO(3)$ das rotações no espaço físico (as suas representações são completamente esgotadas com operadores \hat{L} e \hat{S}), mas ao grupo $SO(2)$ de simetria isotópica (as vezes associado às chamadas rotações no espaço isotópico).

Operador actua sobre estados de 1 nucleão, $|p\rangle$ e $|n\rangle$, segundo:

$$\hat{I}_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle, \quad \hat{I}_3|n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle$$

então as outras componentes são evidentes:

$$\hat{I}_+|n\rangle = |p\rangle, \quad \hat{I}_-|p\rangle = |n\rangle, \quad \hat{I}_+|p\rangle = \hat{I}_-|n\rangle = 0,$$

$$\text{onde} \quad \hat{I}_\pm = \hat{I}_1 \pm i\hat{I}_2,$$

implicando as relações canónicas:

$$[\hat{I}_i, \hat{I}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{I}_k$$

Por fim, para um nucleão se construi o operador

$$\hat{I}^2 = \hat{I}_1^2 + \hat{I}_2^2 + \hat{I}_3^2 = I(I + 1) \quad (= 3/4)$$

e para um sistema de vários nucleões:

$$\hat{I} = \sum_{\alpha} \hat{I}_{\alpha} \quad , \text{ o operador de spin isotópico total.}$$

Aparte dos nucleões, existem outras partículas classificadas segundo valores próprios de

$$I = 1, \quad I_z = \begin{cases} 1 \rightarrow \pi^+, \\ 0 \rightarrow \pi^0, \\ -1 \rightarrow \pi^-, \end{cases}$$

com a *mesma* comutação.

Obviamente, operador de isospin piónico, $\hat{I}^{(\pi)}$

é sempre comutativo com o nucleónico, $\hat{I}^{(N)}$

embora, para simplificar a escrita, os índices hadrónicos podem ser omitidos.

A carga eléctrica dos nucleões pode tratar-se como valor próprio de operador de carga:

$$\hat{Q} = e(\hat{I}_3 + 1/2)$$

e a sua conservação em processos nucleares é equivalente a conservada projecção I_3 de isospin total.

Para sistema de dois nucleões, os estados possíveis são:

$$1) \quad \text{triplet } I = 1, \quad I_3 = 1, \quad 0, \quad -1, \text{ ou seja} \\ |pp\rangle, \quad (|pn\rangle + |np\rangle)/\sqrt{2}, \quad |nn\rangle.$$

Cada destes estados tem a função de onda simétrica em variável isotópica, portanto ela deve ser antissimétrica em variáveis (\mathbf{r},s) .

$$2) \quad \text{singlet } I = 0, \quad I_3 = 0,$$

que é antissimétrica em p,n , portanto simétrica em (\mathbf{r},s) .

O operador de permutação $\hat{P}(p,n)$

deve ter o valor próprio $+1$ para singlet e -1 para triplet, portanto pode ser expresso através de:

$$\hat{P} = 1 - \hat{I}^2$$

Seguindo o mesmo esquema de adição dos momentos, que para o grupo das rotações, podem ser construídos os estados compostos dos hadrões diferentes, com os valores definidos de I^2 e I_3 totais.

Exemplo:

$$\begin{array}{ccc} \text{pião} & + & \text{nucleão} \\ I = 1 & + & I = 1/2 \end{array}$$

O seu estado composto com valores definidos de I e I_3 está dado pela soma:

$$|I, I_3\rangle = \sum_{I_{3,\pi}, I_{3,N}} |I_{3,\pi}, I_{3,N}\rangle \langle 1, 1/2, I_{3,\pi}, I_{3,N} | 1, 1/2, I, I_3\rangle$$

dos estados com valores definidos da projecção de isospin para cada hadrão (definidos tipos das partículas) vezes os c. C.-G.

Mas é também evidente que não faz sentido adição do isospin e momento angular comum, porque eles correspondem as simetrias diferentes.

Explicitamente, estes estados compostos são:

$$\begin{aligned}
 |3/2, 3/2\rangle &= |\pi^+, p\rangle, & Q = 2 \\
 |3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^+, n\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0, p\rangle, & Q = 1 \\
 |3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^-, p\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0, n\rangle, & Q = 0 \\
 |3/2, -3/2\rangle &= |\pi^-, n\rangle, & Q = -1 \\
 \\
 |1/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^+, n\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^0, p\rangle, & Q = 1 \\
 |1/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^-, p\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0, n\rangle. & Q = 0
 \end{aligned}$$

As forças nucleares *não produzem* transições entre estes estados (e também entre combinações deste tipo dos outros hádrões).

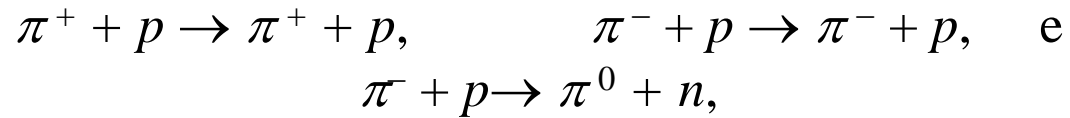
A invariância de carga significa que os seguintes elementos de matriz são iguais para todos Q dentro de multiplet:

$$\langle I, I_3 | \hat{H}_f | I', I'_3 \rangle = \delta_{II'} \delta_{I_3 I'_3} h(I)$$

não depende de I_3 , mas
pode depender de resto
dos números α

Assim o operador de interacção forte deve ser um escalar isotópico (por exemplo, $\sim \sum_{\alpha\beta} \hat{I}_\alpha K_{\alpha\beta} \hat{I}_\beta$).

Considerando as três reacções nucleares:



encontramos os elementos de matriz correspondentes:

$$\begin{aligned} \langle \pi^+ p | \hat{H}_f | \pi^+ p \rangle &= \langle 3/2, 3/2 | \hat{H}_f | 3/2, 3/2 \rangle = h(3/2) \\ \langle \pi^- p | \hat{H}_f | \pi^- p \rangle &= \frac{1}{3}h(3/2) + \frac{2}{3}h(1/2) \\ \langle \pi^- p | \hat{H}_f | \pi^0 n \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{3} [h(3/2) - h(1/2)] \end{aligned}$$

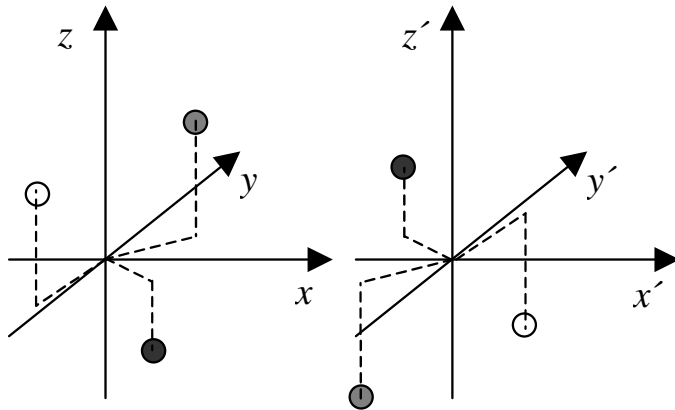
Experimentalmente se conhece que para o caso de energia relativa ao centro de massa $\varepsilon_{c.m.} = 154 \text{ MeV}$ (que apresente neste caso a variável α): $h(3/2) \gg h(1/2)$. Portanto as razões das secções efectivas para os três processos são:

$$\begin{aligned} \sigma_{\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p} : \sigma_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p} : \sigma_{\pi^- p \rightarrow \pi^0 n} &= \\ &= \left| \langle \pi^+ p | \hat{H}_f | \pi^+ p \rangle \right|^2 : \left| \langle \pi^- p | \hat{H}_f | \pi^- p \rangle \right|^2 : \left| \langle \pi^- p | \hat{H}_f | \pi^0 n \rangle \right|^2 = \\ &= 9 : 1 : 2, \end{aligned}$$

e o último resultado bem verifica-se em experimento.

Outros números quânticos para hádrões, como estranheza (strangeness), charm, flavor, etc., correspondem às simetrias ainda mais profundas das partículas e campos relacionados.

Simetrias de inversão



Inversão espacial. Esta simetria não tem nenhum integral de movimento correspondente em mecânica clássica. Em mecânica quântica definimos o operador de inversão:

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$$

Este operador comuta com Hamiltoniano:

$$[\hat{H}, \hat{I}] = 0$$

e também com o momento cinético: $[\hat{L}, \hat{I}] = 0$.

Desde o facto que concluímos que os seus valores próprios são $P = \pm 1$, correspondentes às funções próprias pares:

$$\hat{I}\psi_p(\mathbf{r}) = \psi_p(\mathbf{r})$$

e ímpares:

$$\hat{I}\psi_i(\mathbf{r}) = -\psi_i(\mathbf{r})$$

O valor P chama-se paridade, ele conserva-se aparte de L, M :

$$|L, M, P\rangle \quad \text{estado de paridade definida}$$

logo denotamos estados

$$\begin{aligned} |L, M, 1\rangle &\rightarrow |g\rangle, \\ |L, M, -1\rangle &\rightarrow |u\rangle. \end{aligned}$$

Os operadores escalares dividem-se em dois tipos segundo o seu comportamento com respeito à inversão:

$$\begin{aligned} \hat{I}f &= f\hat{I}, & \text{escalar verdadeiro} \\ \hat{I}f &= -f\hat{I}. & \text{pseudoescalar} \end{aligned}$$

Os escalares verdadeiros só têm os elementos entre estados de mesma paridade:

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} & g & & u \\ f_{gg} & & 0 & \\ 0 & & f_{uu} & \\ & & & \end{pmatrix} \begin{matrix} g \\ \\ u \end{matrix}$$

quando os pseudoescalares:

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} 0 & f_{gu} \\ f_{gu} & 0 \end{pmatrix}$$

Também dividem-se os operadores vectores:

$$\hat{V}_p(\mathbf{r}) = -\hat{V}_p(-\mathbf{r}), \quad \text{vector polar}$$

$$\hat{V}_a(\mathbf{r}) = +\hat{V}_a(-\mathbf{r}), \quad \text{axial (pseudovector)}$$

com relações de comutação: $\{\hat{V}_p, \hat{I}\} = 0$ $[\hat{V}_a, \hat{I}] = 0$

$g-u$ $g-g, u-u$

Portanto operadores \hat{V}_p têm só elementos de matriz de tipo gu quando \hat{V}_a - gg e uu .

Desde análise dos harmónicos esféricos concluimos que paridade dum estado $|L, M\rangle$ é: $P = (-1)^L$.

Inversão de tempo.

Para partículas *sem* spin a função de onda depende de tempo como:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, 0)e^{iEt/\hbar}$$

↑
pode escolher-se real

A operação de inversão de tempo : $t \rightarrow -t$, transforma esta função de modo: $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^*(\mathbf{r}, t)$.

Para partículas com spin $1/2$ as componentes de spinor transformam-se sob \hat{T} como:

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -\psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

então esta função *não pode ser idêntica* à inicial até um factor constante. Mas \hat{T} comuta com Hamiltoniano, portanto corresponde à mesma energia que ψ . Isso significa a degenerescência dupla de cada nível de energia. A formulação mais geral deste facto corresponde à teorema de Kramers:

Cada nível de energia de sistema com momento total J semi-inteiro é pelo menos 2 vezes degenerado, e esta degenerescência manteve-se em presença de qualquer campo eléctrico (sem campo magnético).