

Spin do Elétron

Até agora o elétron, partícula pontual simbolizada por e^- , tem seu estado $|\psi\rangle$, na representação das coordenadas, dado por $\psi(x, y, z)$. Nesta representação (puramente espacial) e considerando apenas a interação colombiana entre o elétron e o próton de H, resolvemos o átomo de hidrogênio, e obtivemos os autoestados $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ e o espectro de H,

$$E_n = -\frac{E_i}{n^2} \begin{cases} 1s \\ 2s \quad 2p \\ 3s \quad 3p \quad 3d \\ n^{\text{"}\ell\text{"}} \dots \\ \vdots \end{cases} \Rightarrow n \text{ é o número quântico principal} \begin{cases} s \rightarrow \ell = 0 \\ p \rightarrow \ell = 1 \\ d \rightarrow \ell = 2 \\ \vdots \end{cases}$$

Previsão precisa, mas não exata. O que está faltando? $\begin{cases} \text{efeitos relativísticos} \\ \text{efeitos magnéticos} \end{cases}$

- Na pós-graduação estudaremos a equação de Dirac, onde o spin surge de forma natural.
- Neste capítulo, introduziremos efeitos relativísticos na mecânica quântica, no limite para velocidades pequenas, com auxílio do formalismo de Pauli (mais 3 postulados) que incorporou spin de forma não-relativística.

Introdução ao Spin do Elétron

- São inúmeras as evidências experimentais da existência do spin do elétron. Muitas das propriedades magnéticas de materiais só podem ser explicadas se o spin do elétron for levado em consideração.
- Neste capítulo, olharemos para alguns fenômenos de física atômica (com verificação experimental relativamente simples).
 - Os fenômenos
 - Estrutura fina: a linha de transição $2p \rightarrow 1s$ é dupla.
 - Efeito Zeeman (átomo sujeito à um campo magnético).
 - Experimento de Stern-Gerlach (átomo de prata).

Estrutura fina das linhas espectrais

- Um estudo experimental preciso para o átomo de hidrogênio revela uma estrutura fina em seu espectro: cada linha pode ser um conjunto de diversas componentes com frequências quase idênticas. Por exemplo a linha ressonante da transição $2p \rightarrow 1s$ é de fato dupla, sendo que a diferença entre elas é da ordem de 10^{-4}eV . Isso é 10^5 vezes menor que a energia de transição calculada ($10,2 \text{eV}$) no capítulo 7 de F689.
- Veremos que a origem deste fenômeno está no acoplamento spin-órbita (interação entre momentos magnéticos de origem orbital e de spin).

Mais evidências experimentais

Efeito Zeeman “anômalo”

- Quando um átomo é colocado em um campo magnético uniforme, cada aparente linha única da sua estrutura fina se separa em um número de linhas equidistantes (a distância entre elas é proporcional ao campo magnético). *Esse é efeito Zeeman.* A origem desse fenômeno é facilmente explicada, se associarmos um momento magnético \mathbf{M} ao momento angular orbital \mathbf{L} do elétron:

$$\mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}, \text{ onde } \mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} \text{ é o “magnéto” de Bohr}$$

- Essa teoria é confirmada em diversos casos (efeito Zeeman normal), mas falha em alguns casos, principalmente quando o número atômico Z é ímpar (efeito Zeeman “anômalo”). Nesse caso, os níveis são separados em um número par de níveis e não ímpar como a teoria indica ($2\ell + 1$ níveis degenerados).

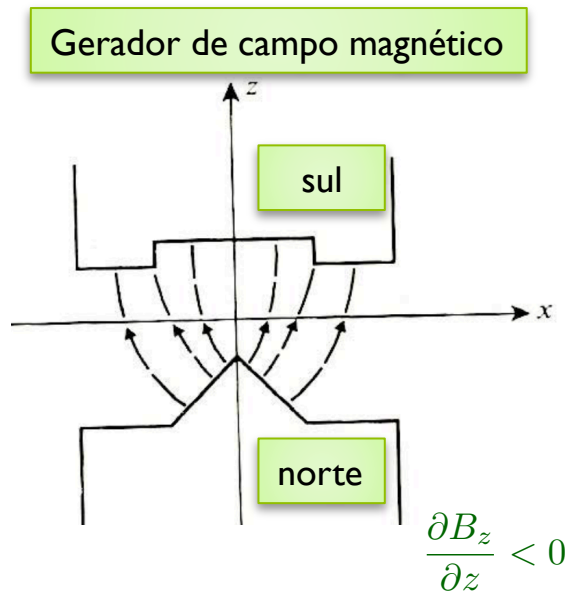
Existência do momento angular 1/2

- Não é possível medir diretamente o momento angular do elétron usando o mesmo aparato de Stern-Gerlach que usamos para o átomo de prata (aula 17 de F689). Isso porque, diferentemente dos átomos de prata, os elétrons têm carga e o fenômeno seria completamente mascarado pelos efeitos da força de Lorentz $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$.
- Em seguida, faremos uma pequena revisão da aula 17 de F689.

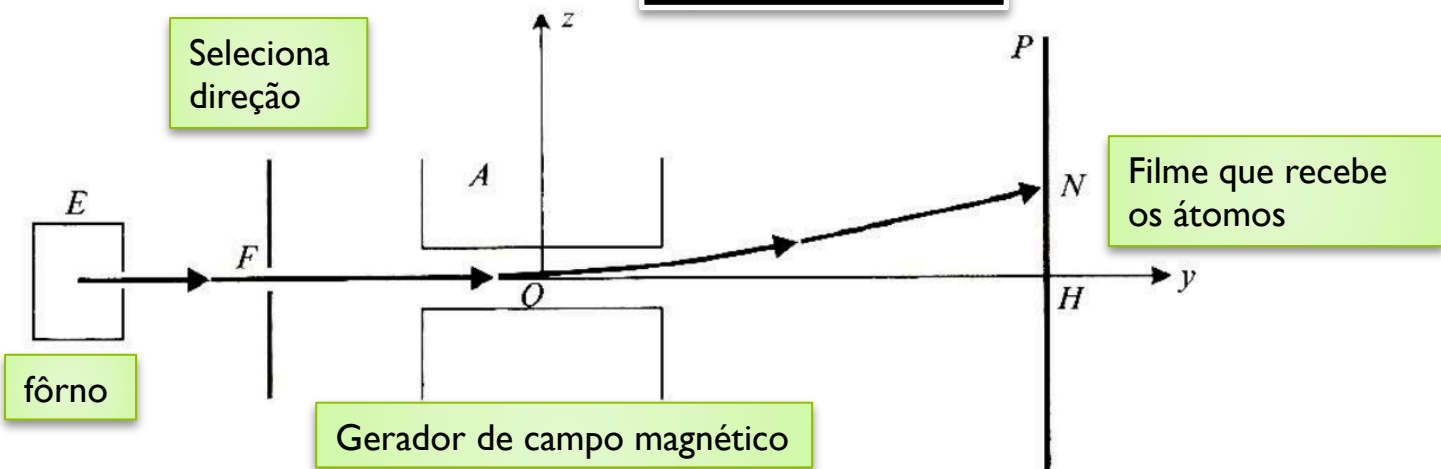
Spin 1/2 e sistemas de dois níveis

A experiência de Stern-Gerlach

- Objetivo: { Estudar a deflexão de um feixe de átomos paramagnéticos neutros em um campo magnético altamente não homogêneo.



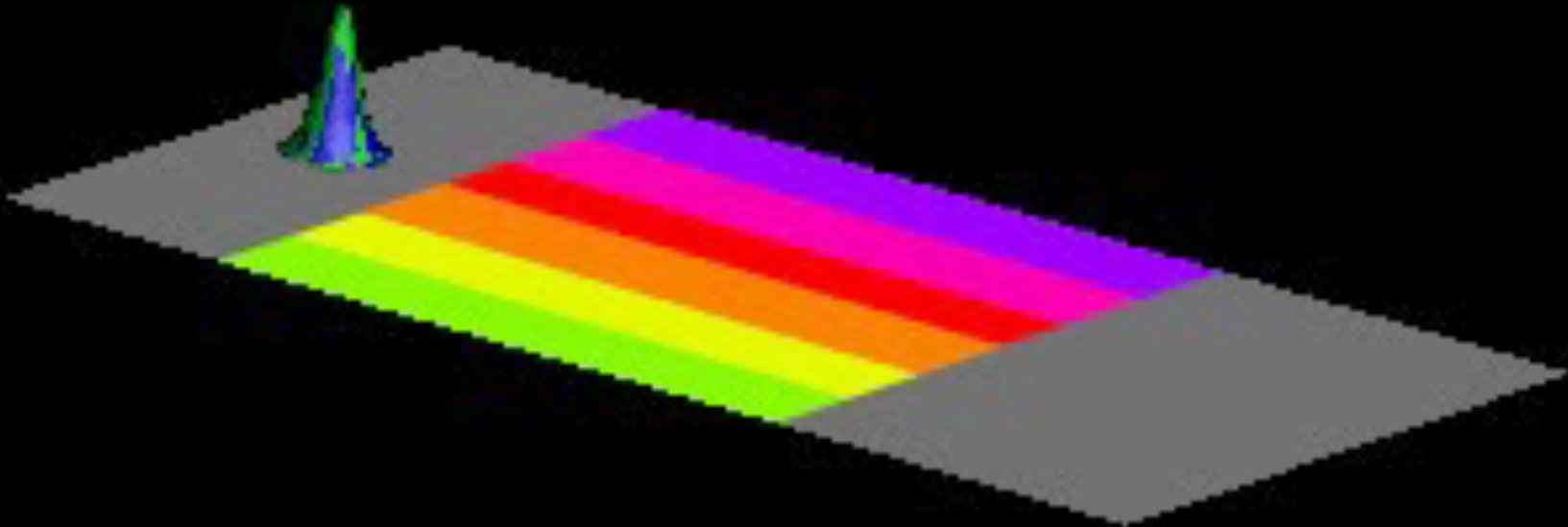
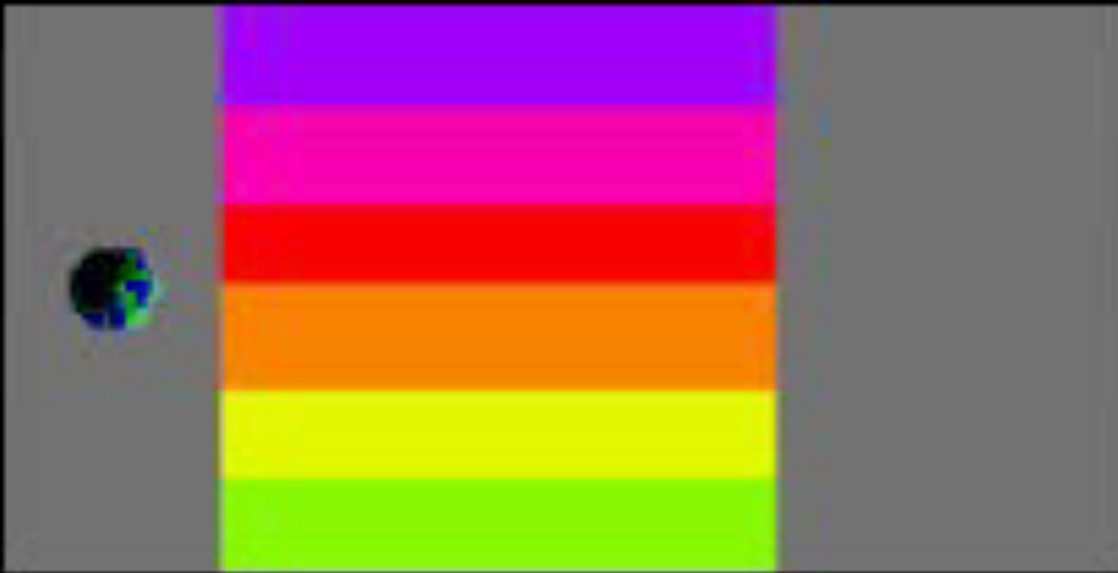
Figs. I, cap. 4 do texto





Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron

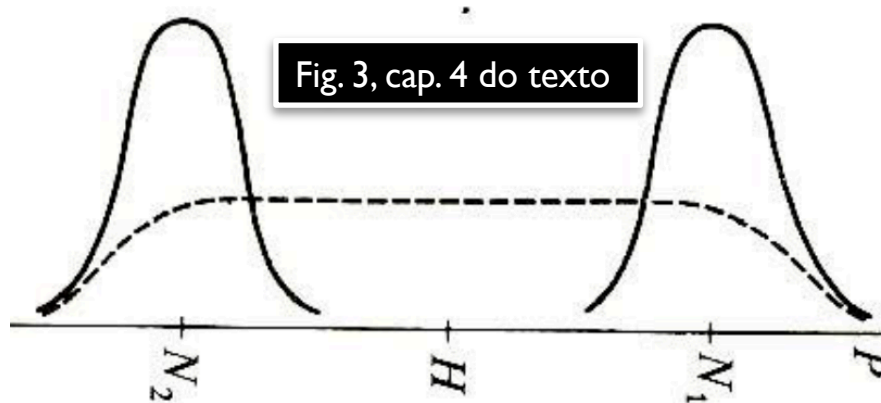
Visão Clássica



Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron
Visão Quântica

A experiência de Stern-Gerlach (1922)

- O experimento não mostrou uma única mancha centrada em H , mas duas manchas centradas em N_1 e N_2 , simétricas com respeito à H (a largura foi interpretada como efeito de dispersão das velocidades iniciais e outros efeitos da fenda que seleciona o feixe de átomos).
- Para explicar o que estava acontecendo, não foi preciso considerar \vec{r} e \vec{p} , as coordenadas canônicas do centro de massa do átomo de prata. Bastou tratar quanticamente as coordenadas internas \mathbf{M} e \mathbf{S} .
- O experimento mostrou que qualquer que fosse a orientação \mathbf{n} do campo \mathbf{B} , apenas dois resultados eram possíveis: dois valores para $\mathbf{M}\cdot\mathbf{n}$, e portanto, só dois valores possíveis para $\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}$ (os autovalores $\pm \hbar/2$ deste operador, com regras comutação de momento angular, explicaram o fenômeno).



Descrição quântica: um pouco da história

- Para resolver as dificuldades apresentadas, Uehlenbeck e Goudsmit (1925), propuseram a seguinte hipótese: o elétron “gira” e isso dá à ele um momento angular intrínseco, o qual é chamado *spin* (girar em inglês).
- Para interpretar os resultados encontrados foi preciso assumir que o momento magnético \mathbf{M}_s estivesse associado ao momento angular de spin \mathbf{S} de forma semelhante, mas não igual ao caso orbital. Para o spin seria: $\mathbf{M}_s = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$, uma constante de proporcionalidade duas vezes maior (de fato, mais tarde, a eletrodinâmica quântica nos ensinou que esse coeficiente de proporcionalidade difere da ordem de 10^{-3} de 2).
- De qualquer forma, dizemos que a razão giromagnética de spin é duas vezes maior que a razão giromagnética orbital.
- Pauli, em seguida, reformulou essa idéias de maneira mais precisa e forneceu uma descrição quântica do spin que é válida no limite não-relativístico. Um resumo de sua contribuição pode ser obtido, adicionando 4 postulados aos apresentados no capítulo 3 do nosso livro texto (mencionados da aula 1).
- Até aqui resolvemos problemas no espaço \mathcal{E}_r , o espaço orbital de estados. Precisaremos “ampliar” esse espaço para descrever o spin do elétron.

Os postulados da teoria de Pauli

Além das variáveis orbitais (\mathbf{R} e \mathbf{P}), precisamos adicionar variáveis de spin que satisfaçam os seguintes postulados:

Postulado 1

- *O operador de spin é um operador do tipo momento angular, isto é, satisfaz as regras de comutação:*

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \text{ ou melhor } [S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

Isto era esperado, pois vimos que as regras de comutação foram suficientes para definir o espectro de momento angular. No caso de momento angular orbital, onde tínhamos, por analogia clássica, a definição de L_x, L_y , e L_z , obtivemos que o espectro the $\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ era o mesmo, qualquer que fosse a orientação de $\hat{\mathbf{n}}$.

Postulado 2

- *Os operadores de spin atuam em um novo espaço \mathcal{E}_S (espaço de estados de spin), onde \mathbf{S}^2 e S_z constituem um CCOC. O espaço \mathcal{E}_S , desta forma, pode ser descrito pelo conjunto de autoestados $\{|s, m\rangle\}$, comuns à \mathbf{S}^2 e S_z , e tais que: $\mathbf{S}^2|s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2|s, m\rangle$ e $S_z|s, m\rangle = m\hbar|s, m\rangle$*

De acordo com que aprendemos em F689, as regras de comutação garantiram que s precisa ser positivo, inteiro ou semi-inteiro, incluindo o zero, e que m varia de $-s$ até $+s$ começando em $-s$ e pulando de 1 em 1.

Os postulados da teoria de Pauli

Observação

Uma dada partícula é caracterizada por um valor único de s . A partícula é dita ter spin s . O espaço de estados de spin \mathcal{E}_S é, desta forma, sempre de dimensão $(2s+1)$ e nesse espaço todos os autovalores de \mathbf{S}^2 tem o mesmo valor $s(s+1)\hbar^2$.

Postulado 3

- O espaço de estados \mathcal{E} da partícula de spin s é o produto tensorial de \mathcal{E}_r e \mathcal{E}_s :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$$

Portanto, todas as observáveis de spin comutam com as observáveis orbitais. Exceto para o caso $s = 0$, não é suficiente especificar um ket de \mathcal{E}_r para caracterizar o estado da partícula. Ou seja, o CCOC que define \mathcal{E}_r não é suficiente para definir \mathcal{E} . Um CCOC de \mathcal{E}_S também é necessário. Entretanto, qualquer estado da partícula pode ser escrito como combinação dos vetores obtidos pelos produtos tensoriais de kets de \mathcal{E}_r e kets de \mathcal{E}_S .

Postulado 4

- O elétron é uma partícula de spin $1/2$ ($s = 1/2$). Para um elétron a dimensão de \mathcal{E}_S é, portanto, 2. Prótons e neutrons também são partículas de spin $1/2$, mas suas constantes giromagnéticas são diferentes da do elétron. Spin não tem análogo clássico: não é uma “bolinha” girando.

Propriedades especiais de um momento angular $1/2$

- Neste capítulo, vamos apenas tratar o caso do elétron, spin $1/2$. Sabemos como lidar com suas variáveis orbitais. No que diz respeito à esse spin,

usaremos a notação $\begin{cases} |+\rangle \\ |-\rangle \end{cases}$ para os autores de S_z , isto é: $\begin{cases} S_z|+\rangle = +\hbar/2|+\rangle \\ S_z|-\rangle = -\hbar/2|-\rangle \end{cases}$

Desta forma, $\mathbf{S}^2|\pm\rangle = +\frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle$ e $\begin{cases} \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \\ \langle +|-\rangle = \langle -|+\rangle = 0 \end{cases} \rightarrow$ sabemos que

$\mathcal{E}_s = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ é completo com $\mathbb{1} = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|$. Note que S_z é um CCOC.

- O vetor normalizado mais geral de \mathcal{E}_s é $|\psi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$ onde c_+ e c_- são complexos e $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$.
- Como os dois autokets de \mathbf{S}^2 têm o mesmo autovalor, \mathbf{S}^2 é proporcional ao operador unidade de \mathcal{E}_s .
- Usando as definições dos operadores $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ do capítulo 6, podemos

escrever $\begin{cases} S_+|+\rangle = 0; & S_+|-\rangle = \hbar|+\rangle \\ S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle; & S_-|-\rangle = 0 \end{cases}$ e definir $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, e as chamadas

matrizes de Pauli: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Propriedades das matrizes de Pauli

Para i, j ou k valendo x, y ou z , seguem propriedades das matrizes de Pauli:

- $$\begin{cases} \sigma_i^2 = 1 \\ \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0 \quad i \neq j \end{cases} \implies \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}$$
- $$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$
- que geram coisas do tipo:
$$\begin{cases} \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1 = 0 \\ \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_2 \sigma_1 = 2i\sigma_3 \end{cases} \implies \sigma_1 \sigma_2 = i\sigma_3$$
- $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$; $\text{Tr}(\sigma_i) = 0$; $\det(\sigma_i) = -1$
- $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ e $\mathbb{1}$ $\begin{cases} \text{formam uma base no} \\ \text{espaço das matrizes } 2 \times 2 \end{cases}$
- $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$. Se $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \neq 0$ não tem problema, desde que ordem seja mantida.
- Essas propriedades valem para \mathbf{S} também. Para verificar, basta multiplicar $\boldsymbol{\sigma}$ por $\frac{\hbar}{2}$, quando for pertinente. Mostre que $S_+^2 = S_-^2 = 0$.
- $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ é Hermiteano, as matrizes 2×2 que representam as suas componentes comutam como momento angular e têm traço igual à zero. *Apenas com essas informações, ache as matrizes de Pauli, na base onde S_z é diagonal, com autovalores $\pm \hbar/2$. Interprete!*