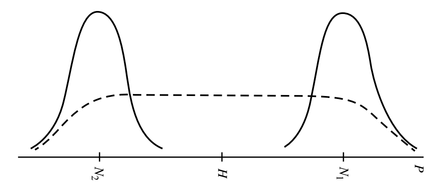
F 789 – Mecânica Quântica II

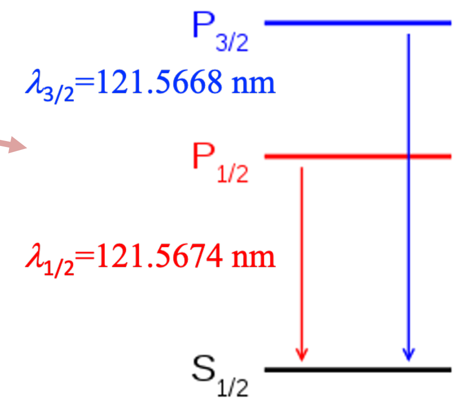
1º Semestre de 2023
05/04/2023
Aula 10

Evidências experimentais da existência do spin

1. Experimento de Stern-Gerlach: duas manchas são evidência de momento angular $j=1/2$, mas o momento angular orbital só permite valores inteiros $l=0,1,2,\ldots$



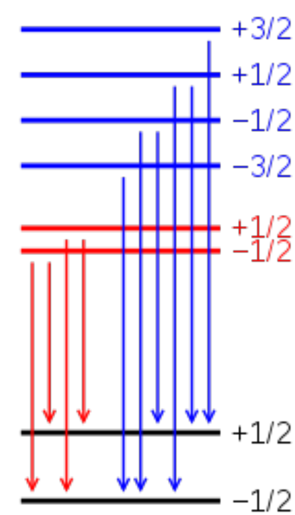
2. Estrutura fina das linhas espectrais: as linhas do espectro são grupos de linhas finamentes espaçadas.



3. O efeito Zeeman: campo magnético fraco, os níveis de energia se abrem em sub-níveis. Momento angular orbital: número <u>ímpar</u> de sub-níveis (efeito Zeeman normal). Observam-se números <u>pares</u> em alguns casos (efeito Zeeman anômalo).

$$H_Z = -\frac{B\mu_B}{\hbar} L_z = -B\mu_B m$$

$$\begin{aligned} l = 0 &\to m = 0 \\ l = 1 &\to m = -1, 0, 1 \\ l = 2 &\to m = -2, -1, 0, 1, 2 \\ &\vdots \;\vdots\; \vdots \end{aligned}$$



Aula passada

Teoria de Pauli:

a) C.C.O.C. agora contém operadores de spin que agem num espaço "interno":

$$\{X,Y,Z\} \to \left\{X,Y,Z,S^2,S_z\right\}$$
$$|\mathbf{r}\rangle \to |\mathbf{r},s,m\rangle$$
$$\{P_x,P_y,P_z\} \to \left\{P_x,P_y,P_z,S^2,S_z\right\}$$
$$|\mathbf{p}\rangle \to |\mathbf{p},s,m\rangle$$
$$m = -s,-s+1,\ldots,s-1,s$$

b) Para $s=1/2$, como o elétron: $s = 1/2 \to |\mathbf{r},\varepsilon=\pm\rangle$ ou $|\mathbf{p},\varepsilon=\pm\rangle$

c) Ao momento angular de spin está associado um momento de dipolo magnético:

$$\mathbf{M} = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{S}$$

Aula passada

Revisão matemática de spin ½:

$$S^2 |\varepsilon\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\varepsilon\rangle$$

$$S_z |\varepsilon\rangle = \varepsilon\frac{\hbar}{2} |\varepsilon\rangle$$

$$S_+ |+\rangle = 0$$

$$S_+ |-\rangle = |+\rangle$$

$$S_- |-\rangle = 0$$

$$S_- |+\rangle = |-\rangle$$

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right] = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrizes de Pauli

$$\sigma_a^2 = \mathbb{1}$$

$$\sigma_a\sigma_b + \sigma_b\sigma_a = 0 \quad (a \neq b)$$

$$\sigma_a\sigma_b = i\epsilon^{abc}\sigma_c \quad (a \neq b)$$

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_a\right) = 0$$

$$\mathrm{Det}\left(\sigma_a\right) = -1$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A}\times\mathbf{B}$$

$\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ são vetores normais ou operadores que comutam com o spin. Se $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ não comutam entre si, a ordem deve ser mantida.

Aula passada

1. Espaço de estados $\mathcal{E}$

$$X\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = x\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle$$
$$Y\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = y\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle$$
$$Z\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = z\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle$$
$$S^2\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle$$
$$S_z\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\varepsilon\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle$$

$$\left\langle \mathbf{r}',\varepsilon' | \mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = \delta_{\varepsilon,\varepsilon'}\delta^{(3)}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)$$ (ortonormalidade)

$$\sum_{\varepsilon}\int d^3r\left|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle\left\langle\mathbf{r},\varepsilon\right| = \mathbb{1}$$ (fechamento)

2. Representação $|\mathbf{r},\varepsilon\rangle$

$$\left\langle \mathbf{r},\varepsilon|\psi\right\rangle = \psi_\varepsilon\left(\mathbf{r}\right) \to \left[\psi\right]\left(\mathbf{r}\right) = \begin{pmatrix}\psi_+\left(\mathbf{r}\right)\\ \psi_-\left(\mathbf{r}\right)\end{pmatrix}$$

$$\left\langle \psi|\mathbf{r},\varepsilon\right\rangle = \psi^*_\varepsilon\left(\mathbf{r}\right) \to \left[\psi\right]^\dagger\left(\mathbf{r}\right) = \begin{pmatrix}\psi^*_+\left(\mathbf{r}\right) & \psi^*_-\left(\mathbf{r}\right)\end{pmatrix}$$

Spinores

Aula passada

Produto escalar:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3r \left[\psi_+^*(\mathbf{r})\,\varphi_+(\mathbf{r}) + \psi_-^*(\mathbf{r})\,\varphi_-(\mathbf{r})\right]$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3r \left[|\psi_+(\mathbf{r})|^2 + |\psi_-(\mathbf{r})|^2\right]$$

Normalização:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3r \left[|\psi_+(\mathbf{r})|^2 + |\psi_-(\mathbf{r})|^2\right] = 1$$

3. Operadores $A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \Rightarrow [\psi'](\vec{r}) = [\![A]\!]\,[\psi](\vec{r})$

SABEMOS QUE A ATUAÇÃO ORBITAL NUMA FUNÇÃO DE ONDA É DO TIPO:

$$X\,\psi(\vec{r}) = x\,\psi(\vec{r})$$

$$P_x\,\psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial x}$$

$$\vdots$$

TAMBÉM SABEMOS A ATUAÇÃO DOS OPERADORES DE SPIN S_x, S_y, S_z NOS KETS $|\varepsilon\rangle$

$$S_z|\varepsilon\rangle = \varepsilon\frac{\hbar}{2}|\varepsilon\rangle$$

$$\vdots$$

E NO CASO DE SPINORES?

a) Operadores de spin: só atuam como matrizes

EXEMPLO:

$$|\psi'\rangle = S_+|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\; S_+|\vec{r},\varepsilon\rangle\langle\vec{r},\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r\, S_+\left[|\vec{r},+\rangle\langle\vec{r},+|\psi\rangle + |\vec{r},-\rangle\langle\vec{r},-|\psi\rangle\right]$$

$$= \int d^3r\;\hbar\,|\vec{r},+\rangle\underbrace{\langle\vec{r},-|\psi\rangle}_{\psi_-(\vec{r})}$$

$$|\psi'\rangle = \hbar\int d^3r'\,\psi_-(\vec{r}\,')\,|\vec{r}\,',+\rangle$$

$$\underbrace{\langle\vec{r},\varepsilon|\psi'\rangle}_{\psi'_\varepsilon(\vec{r})} = \hbar\int d^3r'\,\psi_-(\vec{r}\,')\underbrace{\langle\vec{r},\varepsilon|\vec{r}\,',+\rangle}_{\delta_{\varepsilon,+}\,\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}\,')} = \hbar\,\delta_{\varepsilon,+}\,\psi_-(\vec{r})$$

$$\left.\begin{aligned}\psi'_+(\vec{r}) &= \hbar\,\psi_-(\vec{r})\\ \psi'_-(\vec{r}) &= 0\end{aligned}\right\}\quad \begin{pmatrix}\psi'_+(\vec{r})\\ \psi'_-(\vec{r})\end{pmatrix} = \underbrace{\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}}_{\text{MATRIZ DO } S_+}\begin{pmatrix}\psi_+(\vec{r})\\ \psi_-(\vec{r})\end{pmatrix}$$

A ATUAÇÃO DE S_+ (E DE QUALQUER OPERADOR DE SPIN <u>APENAS</u>) NO SPINOR É A MESMA DA MATRIZ DE S_+ NA BASE $|\varepsilon\rangle$:

$$[\psi'](\vec{r}) = [S_{\hat{i}}][\psi](\vec{r})$$

$\hookrightarrow$ MATRIZ DO OPERADOR S_i NA BASE $|\varepsilon\rangle$

b) Operadores orbitais:

POR EXEMPLO, P_x : $|\psi'\rangle = P_x |\psi\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle \vec{r}, \varepsilon | \psi' \rangle}_{\psi'_\varepsilon(\vec{r})} = \langle \vec{r}, \varepsilon | P_x | \psi \rangle$$

$$= \sum_{\varepsilon'} \int d^3r' \underbrace{\langle \vec{r}, \varepsilon | P_x | \vec{r}', \varepsilon' \rangle}_{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \langle \vec{r}, \varepsilon | \vec{r}', \varepsilon' \rangle} \overbrace{\langle \vec{r}', \varepsilon' | \psi \rangle}^{\psi_\varepsilon(\vec{r}')}$$

$$= \sum_{\varepsilon'} \int d^3r' \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \delta_{\varepsilon,\varepsilon'} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\varepsilon'}(\vec{r}')$$

$$\psi'_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_\varepsilon(\vec{r}) \Rightarrow \begin{pmatrix} \psi'_+(\vec{r}) \\ \psi'_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_+}{\partial x}(\vec{r}) \\ \frac{\partial \psi_-}{\partial x}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$[\psi'](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} [\psi](\vec{r})$$

A ATUAÇÃO DO OPERADOR ORBITAL É A MESMA DE ANTES E A PARTE MATRICIAL É EQUIVALENTE À MATRIZ UNIDADE:

$$[\psi'](\vec{r}) = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}}_{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\mathbb{1}} [\psi](\vec{r})$$

$$[\psi'](\vec{r}) = [\![P_x]\!] [\psi](\vec{r})$$

$$[\![P_x]\!] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\mathbb{1}$$

ISSO VALE P/ QUALQUER OUTRO OPERADOR ORBITAL

c) Operadores mistos: POR EXEMPLO, $L_z S_z$

$$L_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

É RAZOÁVEL SUPOR QUE $L_z S_z$ ATUE EM SPINORES COMO:

$$[\![L_z S_z]\!] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \end{pmatrix}$$

DE FATO, USANDO A RELAÇÃO DE FECHAMENTO COMO ANTES, PROVAMOS QUE ESSE "CHUTE" ESTÁ CORRETO: $|\psi'\rangle = L_z S_z|\psi\rangle$

$$\langle \vec{r}, \varepsilon|\psi'\rangle = \langle \vec{r}, \varepsilon|\, L_z S_z|\psi\rangle$$

$$= \sum_{\varepsilon'} \int d^3r' \, \langle \vec{r}, \varepsilon| L_z S_z |\vec{r}\,', \varepsilon'\rangle\langle \vec{r}\,', \varepsilon'|\psi\rangle = \cdots$$

POR EXEMPLO: $\vec{S}\cdot\vec{P} = S_x P_x + S_y P_y + S_z P_z$

$$= \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\partial}{\partial y} \\ i\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}\right] = (*)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(*) = \frac{\hbar^2}{2i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

4. A representação |**p**,ε>

$$\langle \vec{p}, \varepsilon | \psi \rangle = \bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p}) = \int \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi_\varepsilon(\vec{r})$$

$$[\bar{\psi}](\vec{p}) = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_+(\vec{p}) \\ \bar{\psi}_-(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

E TUDO QUE DEDUZIMOS PARA A REPRESENTAÇÃO $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$ VALE AQUI, COM AS "TRADUÇÕES" DOS OPERADORES ORBITAIS:

$$P_x \bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p}) = p_x \bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p}) ; \ldots$$

$$X \bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p}) ; \ldots$$

Cálculos de probabilidades

PRIMEIRAMENTE, CONSIDERE UMA MEDIDA SIMULTÂNEA DA POSIÇÃO $\vec{r}$ E DA COMPONENTE S_z DO ELÉTRON. NOTEM QUE APENAS MEDIDAS SIMULTÂNEAS DE OPERADORES QUE COMUTAM SÃO NÃO AMBÍGUAS E $\vec{R}$, S_z COMUTAM ENTRE SI.

$$dP_\varepsilon(\vec{r}) = |\langle \vec{r}, \varepsilon | \psi \rangle|^2 \, d^3r = |\psi_\varepsilon(\vec{r})|^2 \, d^3r$$

= PROBABILIDADE DE MEDIR $S_z = \varepsilon \frac{\hbar}{2}$ E POSIÇÃO NUM VOLUME d^3r NA POSIÇÃO $\vec{r}$. (REGRA DE BORN)

a) MEDIDA DE POSIÇÃO E SPIN S_x

OPERADORES $\vec{R}$ E S_x

SE $S_x = \frac{\hbar}{2}$ É OBTIDO, O AUTO-KET É:

$$|\vec{r},+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{r},+\rangle + |\vec{r},-\rangle\right]$$

$$|\vec{r},-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{r},+\rangle - |\vec{r},-\rangle\right]$$

$$dP(\vec{r},\pm_x) = |{}_x\langle\vec{r},\pm|\psi\rangle|^2\, d^3r$$

$$= \frac{1}{2}\left|\left[\langle\vec{r},+| \pm \langle\vec{r},-|\right]|\psi\rangle\right|^2 d^3r$$

$$= \frac{1}{2}\left|\langle\vec{r},+|\psi\rangle \pm \langle\vec{r},-|\psi\rangle\right|^2 d^3r$$

$$= \frac{1}{2}\left|\psi_+(\vec{r}) \pm \psi_-(\vec{r})\right|^2 d^3r$$

b) MEDIDA SIMULTÂNEA DE $\vec{P}$ E S_z:

AUTO-KET : $|\vec{p}, \varepsilon\rangle$

$$dP(\vec{p}, \varepsilon) = |\langle \vec{p}, \varepsilon | \psi \rangle|^2 \, d^3p$$

$$= |\bar{\psi}_\varepsilon(\vec{p})|^2 \, d^3p$$

PARA MEDIDAS INCOMPLETAS, OU SEJA, DE UM CONJUNTO INCOMPLETO DE OPERADORES QUE COMUTAM, PRECISAMOS SOMAR SOBRE OS RESULTADOS DOS OUTROS OPERADORES NECESSÁRIOS PARA COMPLETAR O C.C.O.C, SOMA FORA DO $|\ |^2$.

c) MEDIDA DE POSIÇÃO APENAS SEM DETECÇÃO DO SPIN. $\{x, y, z\}$ → CONJUNTO INCOMPLETO.

$$dP(\vec{r}) = \sum_{\varepsilon} dP_{\varepsilon}(\vec{r}) = \sum_{\varepsilon} |\langle \vec{r}\varepsilon|\psi\rangle|^2 d^3r$$

$$= \sum_{\varepsilon} |\psi_{\varepsilon}(\vec{r})|^2 d^3r$$

$$= \left[|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \right] d^3r$$

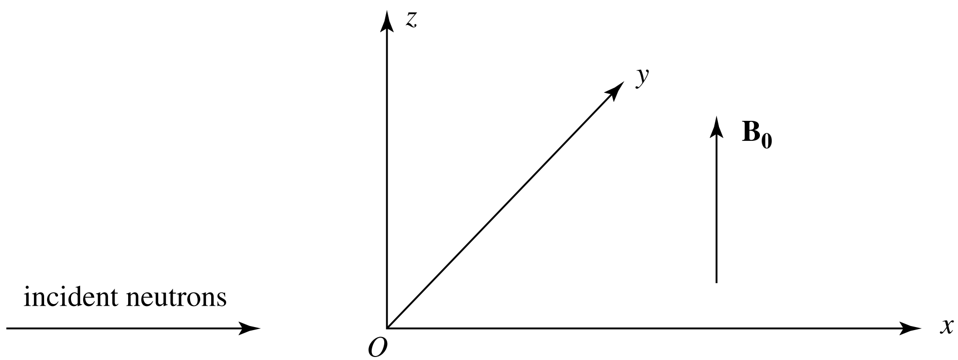
d) MEDIDA APENAS DE S_z:

$$P(\varepsilon) = \int d^3r \, |\langle \vec{r}, \varepsilon|\psi\rangle|^2 = \int d^3r \, |\psi_{\varepsilon}(\vec{r})|^2$$

e) MEDIDA APENAS DE S_x:

$$P_x(\varepsilon) = \int dP(\vec{r}, \pm_x) = \frac{1}{2}\int d^3r \, |\psi_+(\vec{r}) + \varepsilon\psi_-(\vec{r})|^2$$

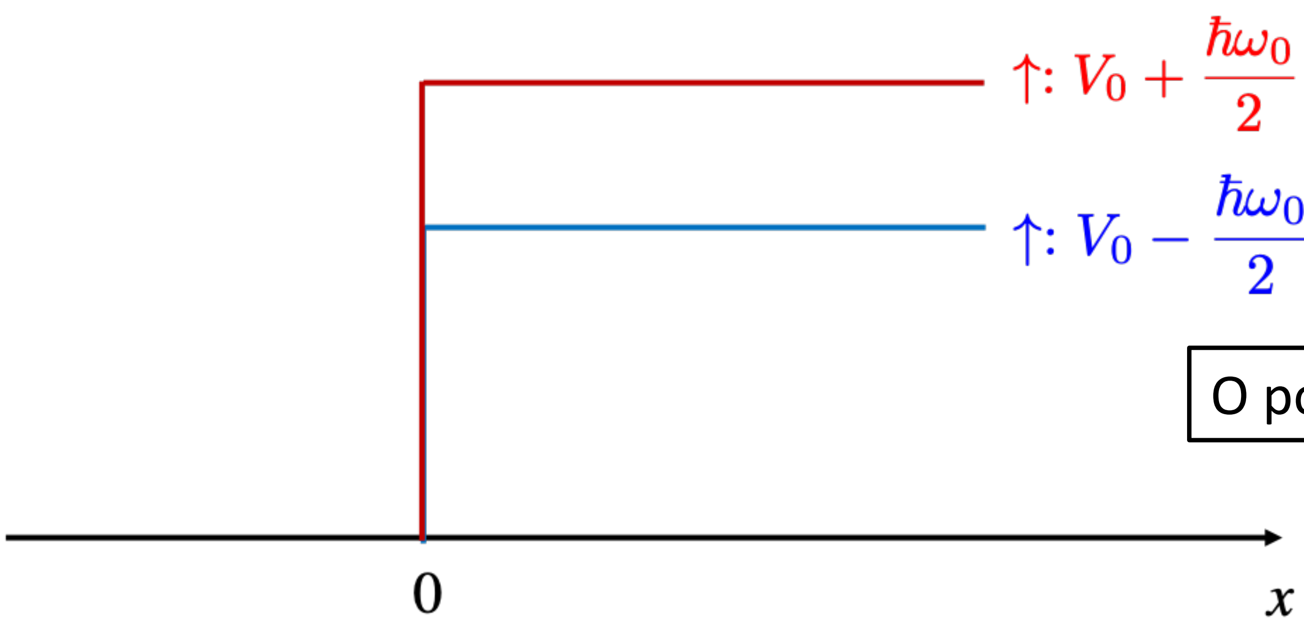
Exemplo: feixe de nêutrons incidente num ferromagneto



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 + \omega_0 S_z & x > 0. \end{cases}$$

$$\omega_0 = -\gamma B_0$$

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$
$$= -\mu_z B_0$$
$$= -\gamma B_0 S_z$$
$$= \omega_0 S_z$$



O potencial depende do spin.