F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023

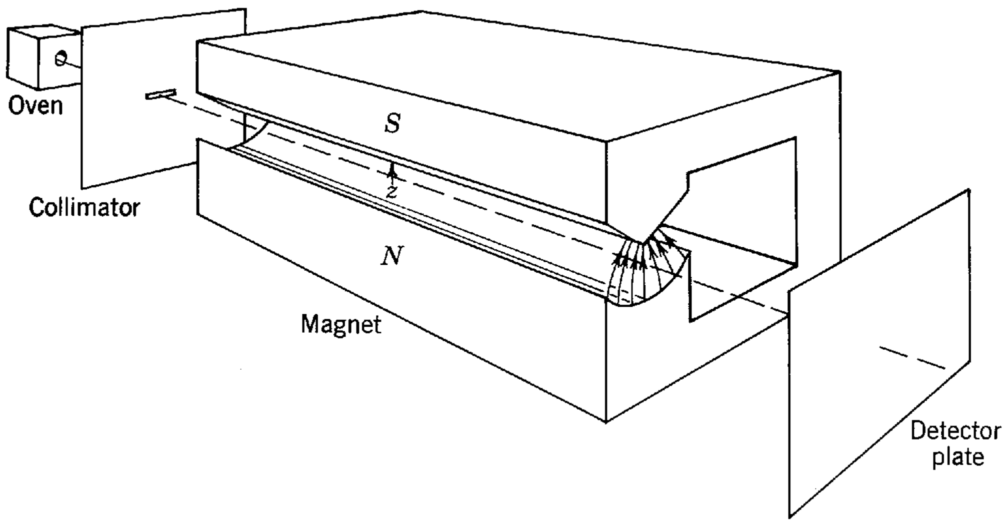
03/04/2023

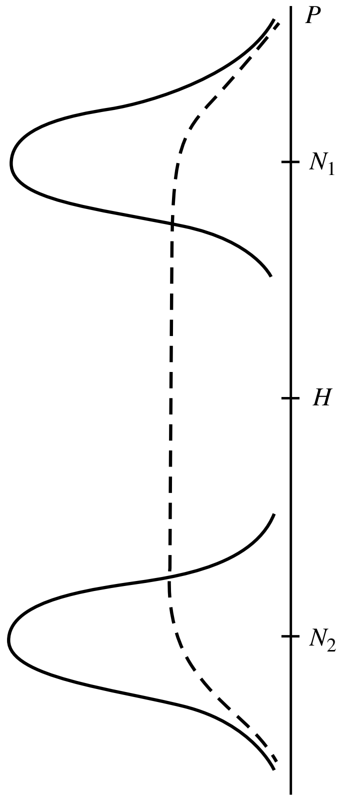
Aula 09

O spin do elétron

Evidências experimentais da existência do spin

1. Experimento de Stern-Gerlach



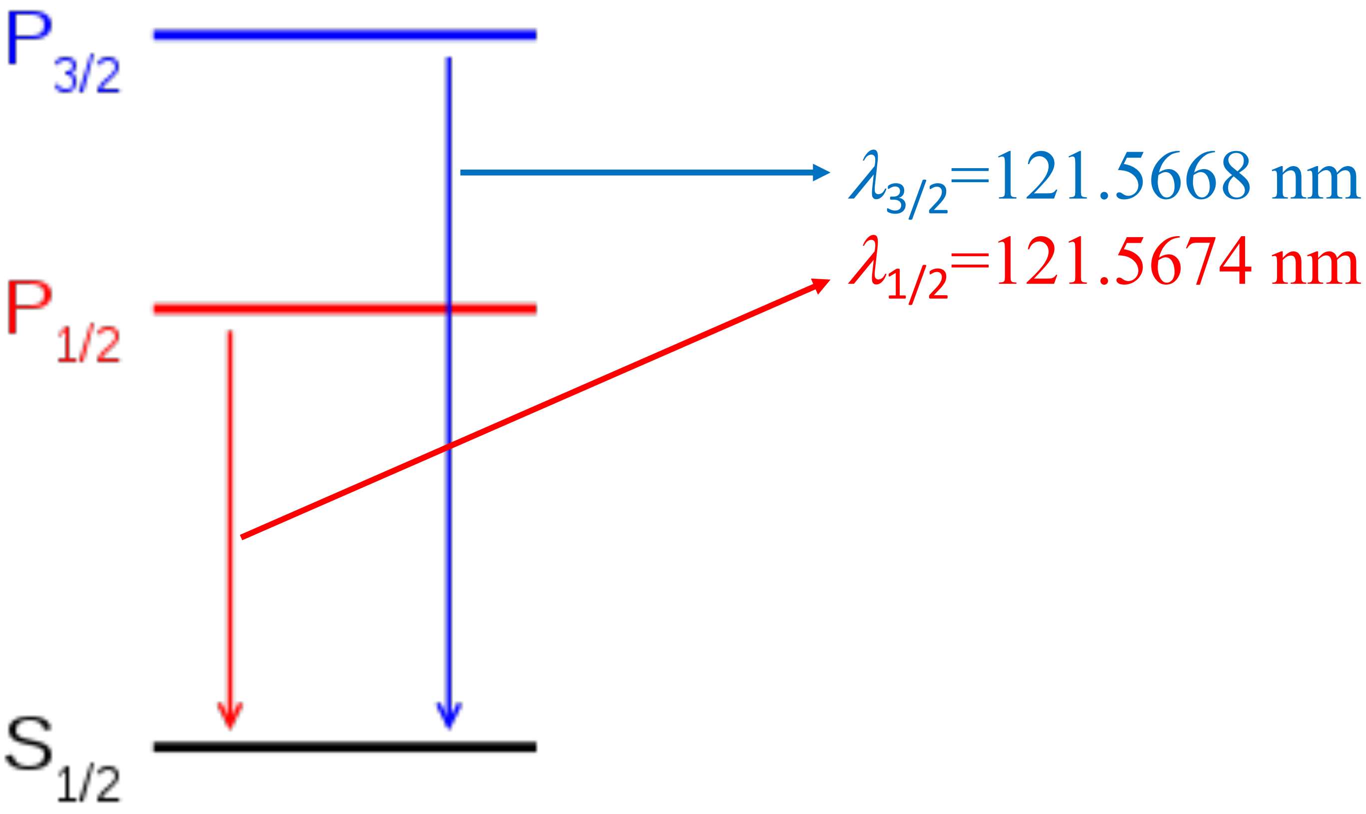


Átomos de prata: duas manchas são evidência de momento angular $j=1/2$, mas o momento angular orbital só permite valores inteiros $l=0,1,2,\ldots$

2. Estrutura fina das linhas espectrais

O espectro dos átomos, quando examinado com alta resolução, revela que o que parecem linhas únicas são, na verdade, conjuntos de linhas finamente espaçadas: estrutura fina.

A transição $2p \rightarrow 1s$ do átomo de hidrogênio (fora de escala). Ao invés de apenas uma linha, observam-se duas linhas finamente espaçadas.



3. O efeito Zeeman anômalo

Energia de interação dos elétrons com o campo magnético:

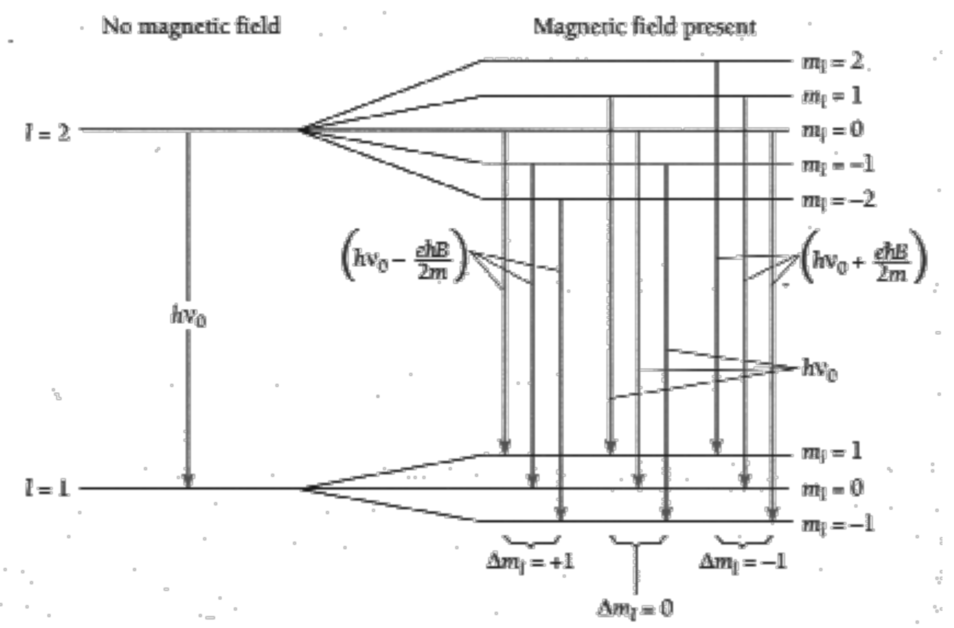
$$H_Z = -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} \qquad \mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Para um campo na direção *z*: $$H_Z = -\frac{B\mu_B}{\hbar}L_z = -B\mu_B m$$

$$l = 0 \rightarrow m = 0$$
$$l = 1 \rightarrow m = -1, 0, 1$$
$$l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2$$
$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots$$

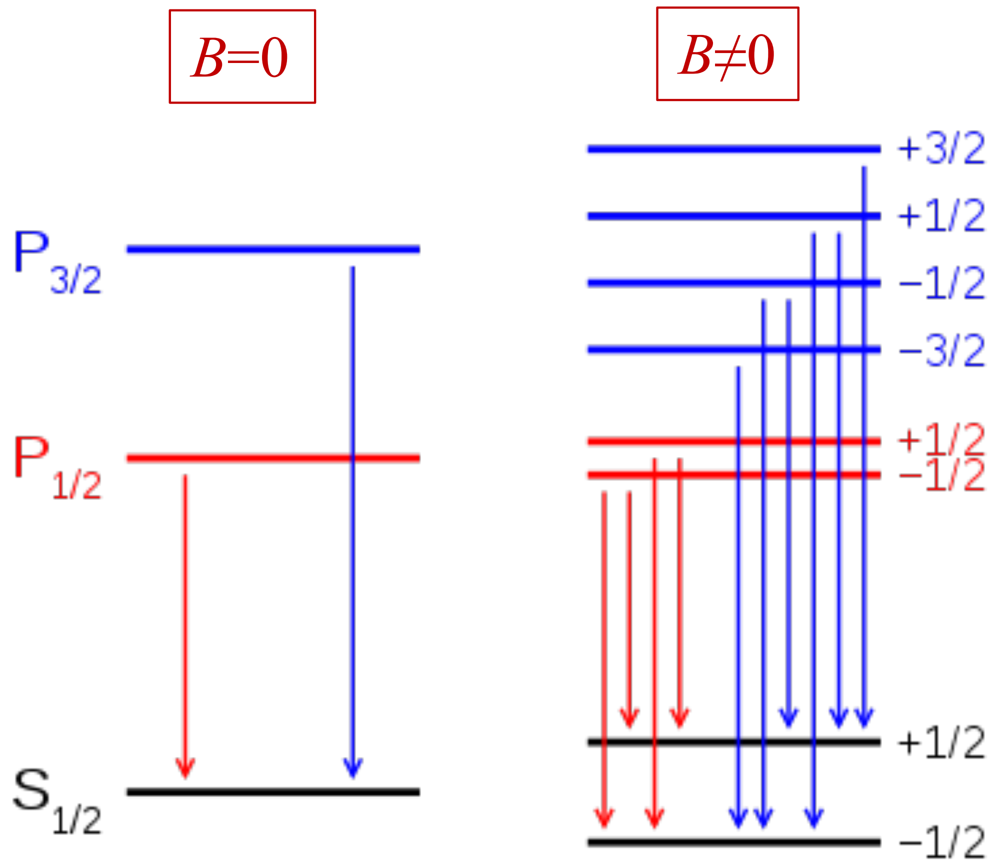
Sempre um número <u>ímpar</u> de energias.

Espera-se que um campo magnético fraco, abra os níveis de energia em um número <u>ímpar</u> de sub-níveis. De fato, observa-se isso frequentemente: efeito Zeeman normal.



3. O efeito Zeeman anômalo

Mas, em alguns casos, vemos um número par de sub-níveis: efeito Zeeman anômalo.
Um exemplo importante é justamente o átomo de hidrogênio.



A transição $2p \rightarrow 1s$ do átomo de hidrogênio na presença de campo magnético (fora de escala).

Postulados da teoria de Pauli

O ELÉTRON (ASSIM COMO OUTRAS PARTÍCULAS) TEM UM MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO, CHAMADO DE SPIN, ALÉM DO SEU MOMENTO ANGULAR ORBITAL: $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$.

1) ALÉM DAS VARIÁVEIS ORBITAIS:

$$(x, y, z) \longrightarrow (X, Y, Z)\ ;\ (p_x, p_y, p_z) \longrightarrow (P_x, P_y, P_z)$$

TAMBÉM É NECESSÁRIO INTRODUZIR OPERADORES DE SPIN: (S_x, S_y, S_z) ; (SEM ANÁLOGO CLÁSSICO)

a) $[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \ldots$

b) ESSES OPERADORES ATUAM NUM ESPAÇO INTERNO, EXPANDIDO POR ESTADOS DO TIPO:

$|s,m\rangle \quad s=1/2, \quad m=-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

$$S^2|s,m\rangle = (S_x^2+S_y^2+S_z^2)|s,m\rangle = \underbrace{s(s+1)}_{3/4}\hbar^2|s,m\rangle$$

$$S_z|s,m\rangle = m\hbar|s,m\rangle$$

2) O ESPAÇO TOTAL DE ESTADOS DO ELÉTRON PRECISA INCORPORAR OS GRAUS DE LIBERDADE DE SPIN:

POR EXEMPLO: (X, Y, Z, S^2, S_z) FORMAM UM C.C.O.C. CUJOS AUTO-ESTADOS SÃO:

$$|x, y, z, s, m\rangle$$

ANALOGAMENTE, $(P_x, P_y, P_z, S^2, S_z)$ FORMAM UM C.C.O.C. CUJOS AUTO-VETORES SÃO: $|p_x, p_y, p_z, s, m\rangle$

3) ASSOCIADO AO SPIN HÁ UM MOMENTO MAGNÉTICO:

$$\vec{\mu}_s = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$ NOTE O FATOR DE 2!

TODOS ESSES FATOS PODEM SER DEDUZIDOS DA EQUAÇÃO RELATIVÍSTICA DE DIRAC.

O spin de outras partículas

Partículas elementares: LÉPTONS (e^-, μ, τ, ν_e, ν_μ, ν_τ)

$\rightarrow S = 1/2$

QUARKS: $S = 1/2$

FÓTON: $S = 1$, $W^\pm$, Z^0 $\rightarrow S = 1$, GLÚONS $\rightarrow S = 1$

GRÁVITON: $S = 2$

HIGGS: $S = 0$

Partículas compostas:

PRÓTON, NÊUTRON: $S = 1/2$

MÉSON $\rightarrow S = 0$

$^4He \rightarrow S = 0$

$^3He \rightarrow S = 1/2$

A matemática do spin 1/2

REVISÃO DO CAP. 4 (STERN-GERLACH)

NOTAÇÃO:
$$|s=1/2, m=1/2\rangle \longrightarrow |+\rangle$$
$$|s=1/2, m=-1/2\rangle \longrightarrow |-\rangle$$
$\Big\}\ |\varepsilon\rangle;\ \varepsilon=\pm$

ASSIM:
$$S^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle$$
$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$$

ORTONORMALIDADE: $\langle\pm|\pm\rangle = 1 \qquad \langle\pm|\mp\rangle = 0$

FECHAMENTO: $\mathbb{1} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|$

ESTADO GENÉRICO DO ESPAÇO $\mathcal{E}_s$: PARA QUALQUER ESTADO $|\chi\rangle \in \mathcal{E}_s$:
$$|\chi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle;\quad c_\pm \in \mathbb{C};\quad |c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$$

ATUAÇÃO DE S_x, S_y:

$$S_\pm = S_x \pm i S_y \Rightarrow S_x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-) \; ; \; S_y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-)$$

$$S_\pm |s,m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}\, |s, m\pm 1\rangle$$

NO CASO PARTICULAR DE $s = 1/2$, $m = \pm 1/2$:

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

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

MATRICIALMENTE, NA BASE $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

POR EXEMPLO: $|+\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$S_-|+\rangle \rightarrow \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \hbar|-\rangle$$

A PARTIR DAS MATRIZES DE $S_{\mathbb{1}}$,

$$S_x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sigma_x$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}$$

ESSA QUÁDRUPLA DE MATRIZES: $(\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

SÃO TAIS QUE, QUALQUER OPERADOR HERMITIANO EM $\mathcal{E}_s$, O:

$$O = a\mathbb{1} + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z \quad \text{ONDE } (a,b,c,d) \in \mathbb{R}$$

$$O = a\mathbb{1} + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z \longrightarrow \begin{pmatrix} a+d & b-ic \\ b+ic & a-d \end{pmatrix}$$

(i) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$

$i = (1,2,3)$ ou (x,y,z)
$j = (1,2,3)$ ou (x,y,z)

(ii) $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0$ (SE $i \neq j$)

(iii) $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma_k$

(iv) $\sigma_i \sigma_j = i\epsilon^{ijk}\sigma_k$ (SE $i \neq j$)

(v) $Tr(\sigma_i) = 0$

(vi) $Det(\sigma_i) = -1$

(vii) $(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$

ONDE: (a) $\vec{A}, \vec{B}$ SÃO VETORES COMUNS <u>OU</u>
(b) $\vec{A}$ E $\vec{B}$ SÃO OPERADORES QUE COMUTAM COM AS σ_i E
SE $\vec{A}$ E $\vec{B}$ SÃO OPERADORES QUE NÃO COMUTAM ENTRE SI
A EXPRESSÃO É VÁLIDA NA ORDEM ACIMA

Descrição quântica de uma partícula com spin 1/2

1. Espaço de estados COMO VIMOS $\{X, Y, Z, S^2, S_z\}$ E $\{P_x, P_y, P_z, S^2, S_z\}$

SÃO DOIS C.C.O.C. PARA UMA PARTÍCULA DE SPIN ½.

PARA OS AUTO-ESTADOS DO PRIMEIRO:

$$|x, y, z, s = 1/2, m = \pm 1/2\rangle \rightarrow |x, y, z, \varepsilon\rangle \longrightarrow |\vec{r}, \varepsilon\rangle$$

ONDE $(x, y, z) \in (-\infty, +\infty)$ E $\varepsilon = \pm$

$$X|\vec{r}, \varepsilon\rangle = x|\vec{r}, \varepsilon\rangle$$

$$Y|\vec{r}, \varepsilon\rangle = y|\vec{r}, \varepsilon\rangle$$

$$Z|\vec{r}, \varepsilon\rangle = z|\vec{r}, \varepsilon\rangle$$

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

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

ORTOGONALIDADE:

SEM SPIN: $\langle \vec{r} | \vec{r}\,' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}\,')$

COM SPIN: $\langle \vec{r}, \varepsilon | \vec{r}\,', \varepsilon' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}\,')\, \delta_{\varepsilon,\varepsilon'}$

FECHAMENTO:

$$\sum_{\varepsilon=\pm} \int d^3r \, |\vec{r},\varepsilon\rangle\langle\vec{r},\varepsilon| = \int d^3r \left[|\vec{r},+\rangle\langle\vec{r},+| + |\vec{r},-\rangle\langle\vec{r},-| \right] = \mathbb{1}$$

(ii) REPRESENTAÇÃO DE UM ESTADO $|\psi\rangle$ QUALQUER NESSA BASE $\{|\vec{r},\varepsilon\rangle\}$

USANDO O FECHAMENTO:

$$\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle = \sum_{\varepsilon=\pm} \int d^3r \, |\vec{r},\varepsilon\rangle \underbrace{\langle\vec{r},\varepsilon|\psi\rangle}_{\psi_\varepsilon(\vec{r})} = \sum_{\varepsilon=\pm} \int d^3r \, \psi_\varepsilon(\vec{r}) \, |\vec{r},\varepsilon\rangle$$

$\psi_\varepsilon(\vec{r}) = \langle\vec{r},\varepsilon|\psi\rangle \longrightarrow$ SÃO NECESSÁRIAS DUAS FUNÇÕES DE ONDA PARA REPRESENTAR O ESTADO!

$$\psi_\varepsilon(\vec{r}) = \langle \vec{r}, \varepsilon | \psi \rangle \longrightarrow \begin{array}{l} \psi_+(\vec{r}) = \langle \vec{r}, + | \psi \rangle \\ \psi_-(\vec{r}) = \langle \vec{r}, - | \psi \rangle \end{array}$$

É USUAL ESCREVER A DUPLA $\psi_+(\vec{r}), \psi_-(\vec{r})$ NUM VETOR-COLUNA, 2x1, CHAMADO SPINOR:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

NA NOTAÇÃO DO LIVRO (QUE NÃO É MUITO COMUM):

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

PARA O BRA, $\langle \psi |$, USANDO O FECHAMENTO:

$$\langle \psi | = \sum_\varepsilon \int d^3r \, \underbrace{\langle \psi | \vec{r}, \varepsilon \rangle}_{\psi_\varepsilon^*(\vec{r})} \langle \vec{r}, \varepsilon | = \sum_\varepsilon \int d^3r \, \psi_\varepsilon^*(\vec{r}) \langle \vec{r}, \varepsilon |$$

$$[\psi]^\dagger(\vec{r}) = (\psi_+^*(\vec{r}), \psi_-^*(\vec{r}))$$

COM ISSO, O PRODUTO ESCALAR DE $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \sum_\varepsilon \int d^3r \underbrace{\langle\psi|\vec{r},\varepsilon\rangle}_{\psi_\varepsilon^*(\vec{r})} \underbrace{\langle\vec{r},\varepsilon|\varphi\rangle}_{\varphi_\varepsilon(\vec{r})}$$

$$= \sum_\varepsilon \int d^3r\, \psi_\varepsilon^*(\vec{r})\varphi_\varepsilon(\vec{r})$$

$$= \int d^3r \left[\psi_+^*(\vec{r})\varphi_+(\vec{r}) + \psi_-^*(\vec{r})\varphi_-(\vec{r})\right]$$

NORMALIZAÇÃO:

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

EM TERMOS DE SPINORES:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3r \,(\psi_+^*(\vec{r}) \;\; \psi_-^*(\vec{r})) \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{r}) \\ \varphi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$