Física do spin

F.S. Navarra

navarra@if.usp.br

Richard Terra (monitor)

richard.terra@usp.br

edisciplinas.if.usp.br

(buscar: física do spin)

Plano do curso

13/03 aula 1: Partículas elementares e idéias da física quântica

20/03 aula 2: Átomo de Bohr, quantização do momento angular

27/03 aula 3: Momento de dipolo magnético, Stern - Gerlach

10/04 aula 4: Efeito Zeeman anômalo

17/04 1ª Prova

24/04 aula 5: Equações de autovalores, matrizes de Pauli

08/05 aula 6: Comutadores, medidas SG sequenciais

15/05 aula 7: Medidas e valores médios

22/05 aula 8: Precessão e adição de spins

29/05 aula 9: Adição de spins

05/06 2ª Prova

12/06 aula 10: Princípio da exclusão de Pauli

19/06 aula 11: Interação hiperfina no hidrogênio

26/06 aula 12: Resonância paramagnética do elétron

03/07 aula 13: Resonância magnética nuclear

10/07 3ª Prova

Avaliação

Três provas : P1 P2 P3

Média das duas melhores : $P = (P_i + P_j)/2$

Substitutiva fechada

Aula 5

Equações de autovalores

Operadores, autovalores, autofunções

Princípios da mecânica quântica

Operadores e autoestados de spin

Comutadores

Mecânica Quântica

(versão de Schrödinger)

Mecânica clássica

$$F = m\,a$$

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad a = \frac{d^2 x}{dt^2}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\boxed{V \;\rightarrow\; x(t)}$$

Mecânica quântica

$$x(t) \;\rightarrow\; \Psi(x,t)$$

Equação de Schrödinger

$$i\,\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

$$\boxed{V \;\rightarrow\; \Psi(x,t)}$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

Ansatz : $$\Psi(x,t) \;=\; \psi(x)\,e^{-i\,E\,t/\hbar}$$

$$i\,\cancel{\hbar}\,(\frac{-i\,E}{\cancel{\hbar}})\,\psi(x)\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi(x)}{\partial x^2}\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}} + V\,\psi(x)\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}}$$

$$E\,\psi = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi}{\partial x^2} + V\,\psi$$

Definição : $$-\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi}{\partial x^2} + V\,\psi \;=\; \hat{H}\,\psi$$

Equação de Schrödinger Independente do Tempo (ESIT)

$$E\,\psi = \hat{H}\,\psi$$

$$\boxed{\hat{H}\,\psi \;=\; E\,\psi}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

Operador Hamiltoniano

Operador = instrução, prescrição

Precisa agir sobre uma função !

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

operador

função

(autofunção)

(autoestado)

número

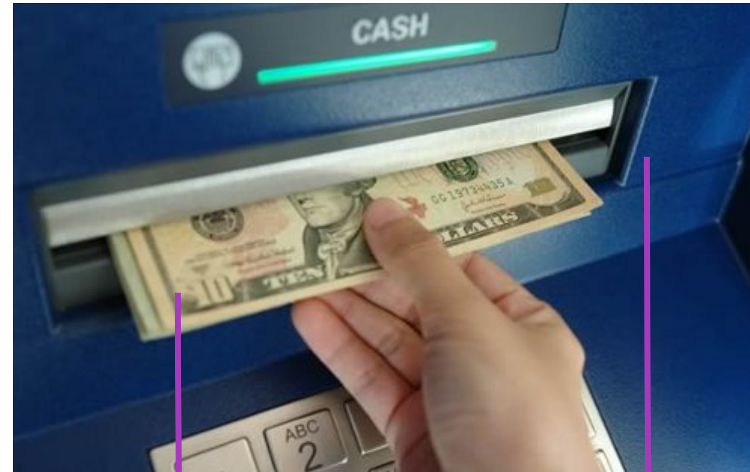
(autovalor)

função

(autofunção)

(autoestado)

Equação de autovalores !



autoestado operador autovalor autoestado

O autoestado contém informações das propriedades observáveis

O operador as extrai !

Átomo de hidrogênio de Schrödinger

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V \qquad V = -\frac{Ze^2}{4\,\pi\,\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

energia potencial

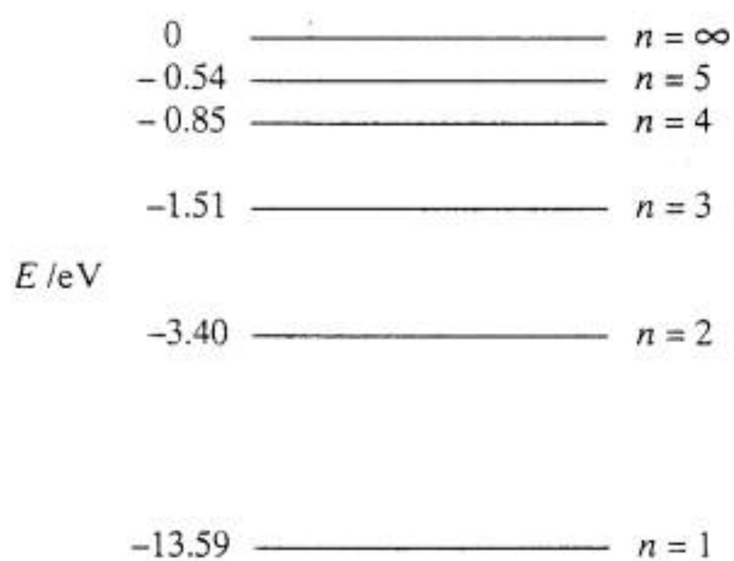
$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

Partícula em movimento confinado !

Esperamos quantização !

Quantização emergente !!!

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n$$



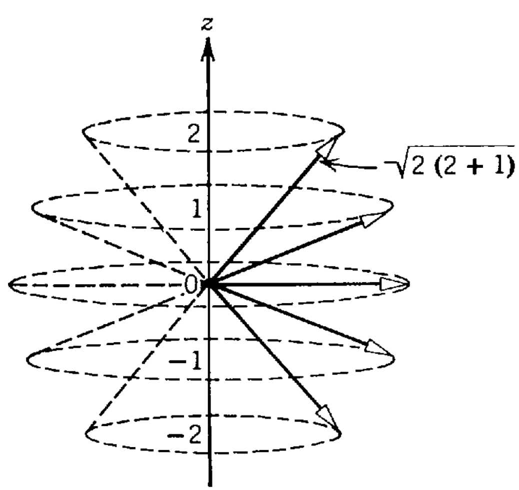
ψ_3

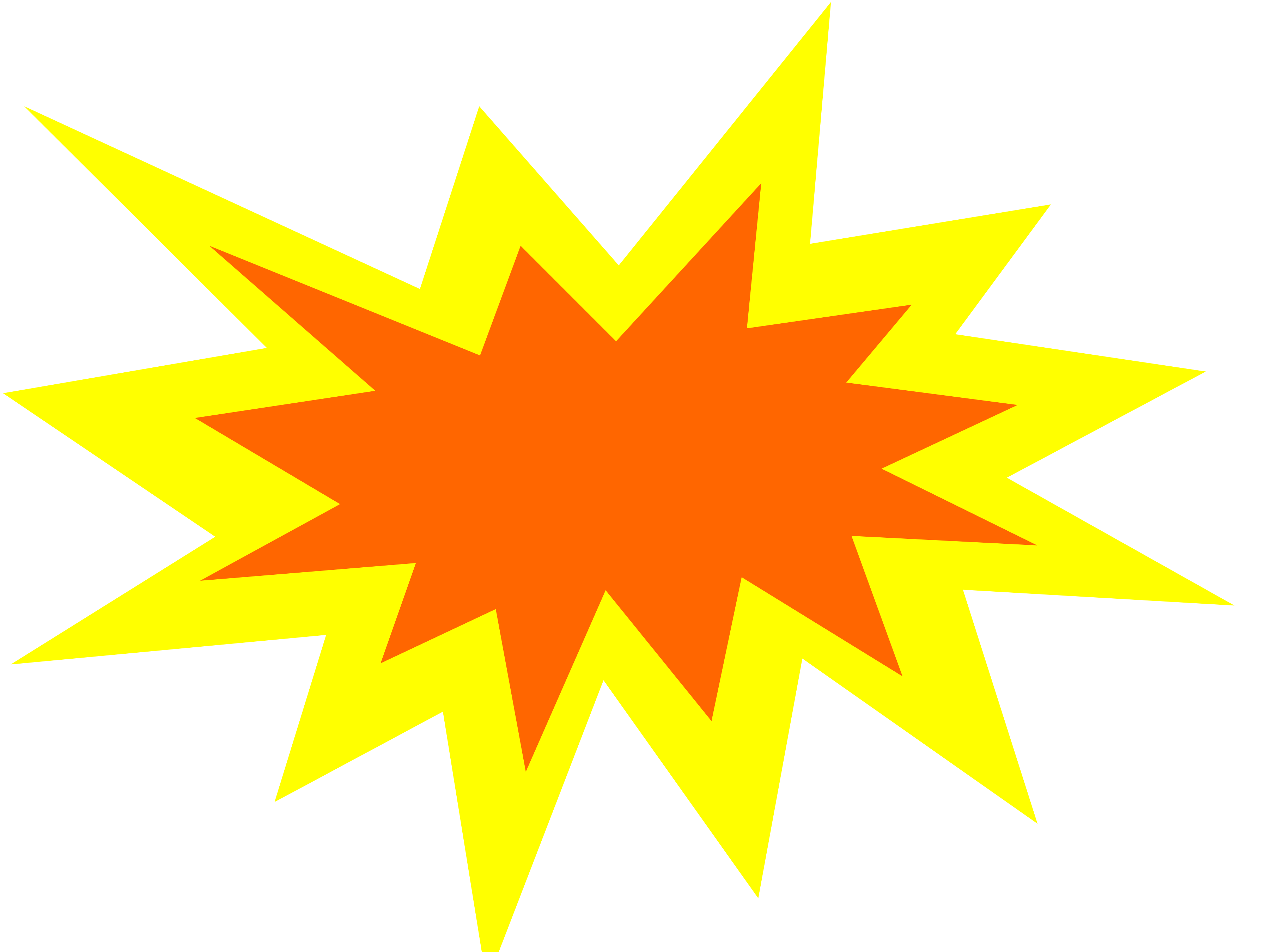
ψ_2

ψ_1

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

$$E = -\,\frac{m}{2}\left(\frac{Z\,e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0\,\hbar}\right)^2\frac{1}{n^2}$$





Princípios da Mecânica Quântica

1) Para as grandezas observáveis existem operadores, autofunções e autovalores.

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

dagger

2) Os operadores são **hermitianos:** $[\hat{O}]^{\dagger} = \hat{O}$

$$[\hat{O}]^{\dagger} = [\,[\,\hat{O}\,]^{*}\,]^{T}$$

adjunto de O = transposto do complexo conjugado

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{A}^{*} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{A}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$$

A é hermitiano !

3) Os operadores hermitianos possuem autovalores reais

4) O resultado de uma medida é sempre um dos autovalores do operador do observável

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n$$

5) Operadores compatíveis admitem conjuntos de autofunções simultâneas

Dois operadores são compatíveis se eles comutam

Dois operadores A e B comutam se o comutador entre eles for zero:

Comutador : $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Operadores compatíveis : $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Equação de autovalores do spin

Operadores de spin

Autoestados de spin

Autovalores de spin

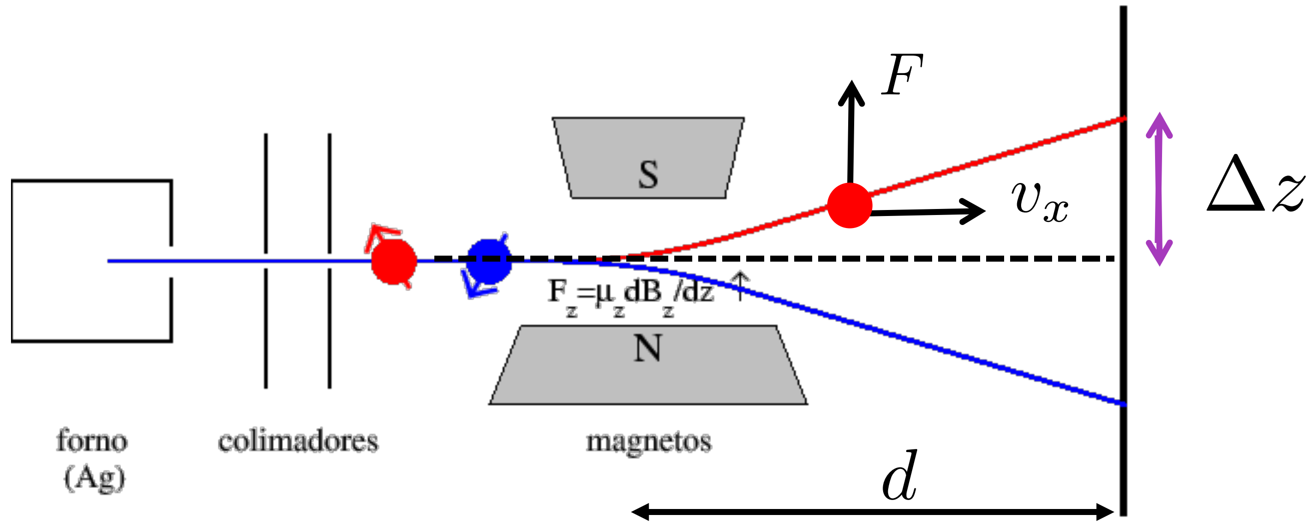
Estes nós medimos !

Stern

Gerlach

Medida do autovalor do spin

Stern - Gerlach
Phipps -Taylor



$$F = g_s\,\mu_b\,m_s\,\frac{\partial B}{\partial z}$$

$$F = m\,a$$

$$a = \frac{g_s\,\mu_b\,m_s}{m}\,\frac{\partial B}{\partial z}$$

$$\Delta z = \frac{1}{2}\,a\,(\Delta t)^2 \qquad d = v_x\,\Delta t$$

$$\Delta z = \frac{1}{2}\,a\,(\frac{d}{v_x})^2$$

$$\Delta z = \frac{1}{2}\,\frac{g_s\,\mu_b\,m_s}{m}\,\frac{\partial B}{\partial z}\,(\frac{d}{v_x})^2$$

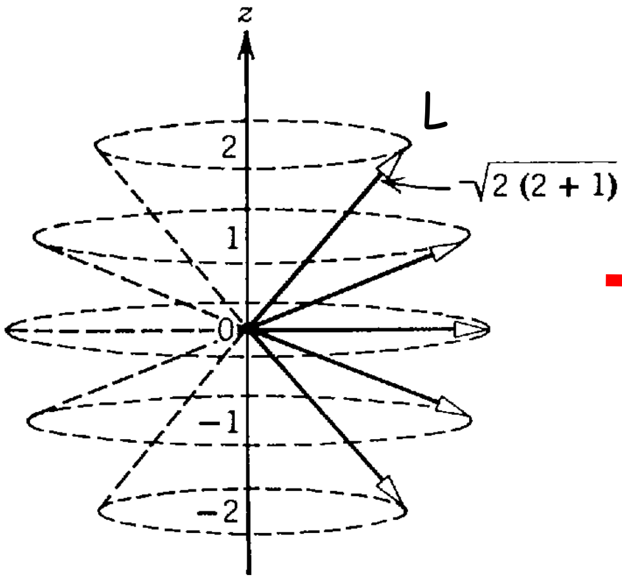
$$\Delta z = \frac{1}{2}\,\frac{g_s\,\mu_b\,m_s}{m}\,\frac{\partial B}{\partial z}\,\left(\frac{d}{v_x}\right)^2$$

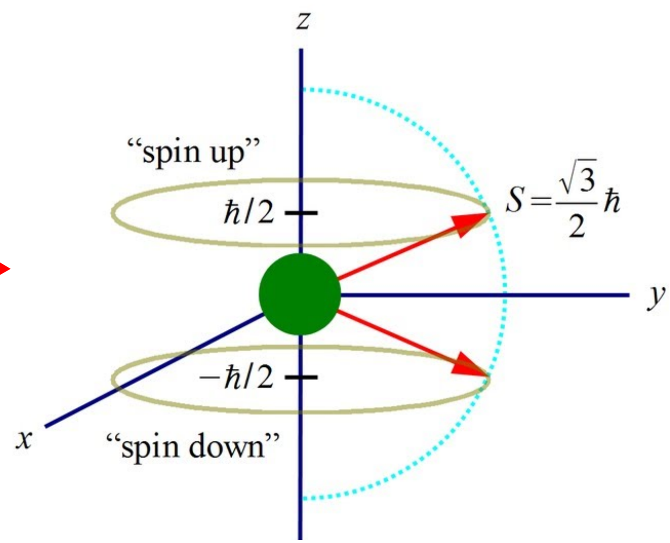
Se $g_s = 2$, tudo é conhecido e obtemos m_s !

$$m_s = -\frac{1}{2}\,,\ +\frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad -s \le m_s \le +s \quad \rightarrow \quad s = \frac{1}{2}$$

m_s observável, real e discreto

s observável, real e discreto





$$S^2 = s\,(s+1)\,\hbar^2$$

$$S_z = m_s\,\hbar$$

Equação de autovalores para o spin

$$S^2 = s\,(s+1)\,\hbar^2$$

$$S_z = m_s\,\hbar$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{S}^2\,\psi = s\,(s+1)\,\hbar^2\,\psi \\ \\ \hat{S}_z\,\psi = m_s\,\hbar\,\psi \end{array} \right.$$

?

Autofunção $\longrightarrow$ Autoestado

$$\psi \rightarrow |\,\psi\,\rangle \qquad |\ \ \rangle = \mathrm{ket}$$

Equação de autovalores para o spin

$$\psi_s = |\, s\,,\, m_s \rangle \begin{cases} = |\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \rangle & \text{ou} \quad |\uparrow\rangle \\ = |\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \rangle & \text{ou} \quad |\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\hat{S}_z \,|\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2}\,\hbar \,|\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \rangle$$ ou $$\hat{S}_z \,|\uparrow\rangle = +\frac{1}{2}\,\hbar\,|\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_z \,|\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{2}\hbar \,|\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \rangle$$ ou $$\hat{S}_z \,|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\,\hbar\,|\downarrow\rangle$$

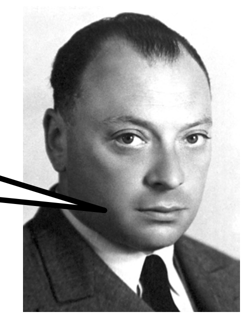
Quem são os operadores e os autoestados de spin ?

$\hat{S}_z$

ψ_s

$\Big\}$ são matrizes !!!

Eu que inventei essas matrizes !



Pauli

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

é hermitiano !

$$\psi_s \begin{cases} |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Funciona ?

$$\boxed{\hat{S}_z\,|\uparrow\rangle = +\frac{1}{2}\hbar\,|\uparrow\rangle}$$

O retângulo da alegria ...

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

$$\boxed{\hat{S}_z\,|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\,|\downarrow\rangle}$$

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

Equação de autovalores para o spin

$$\begin{cases} \hat{S}_z \, \psi \; = \; m_s \, \hbar \, \psi \\[2ex] \hat{S}^2 \, \psi \; = \; s\,(s \, + \, 1)\, \hbar^2 \, \psi \end{cases}$$

?

$$\hat{S}^2 \; = \; \hat{S}_x^2 \, + \, \hat{S}_y^2 \, + \, \hat{S}_z^2$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrizes de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

operador $\left\{ \quad \hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \right.$

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \qquad \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$+\ \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \qquad \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$+\ \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

$$\hat{S}^2\,\psi = s\,(s+1)\,\hbar^2\,\psi = \frac{3\,\hbar^2}{4}\,\psi$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad\qquad \psi = \psi_1 = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2\,|\uparrow\rangle = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

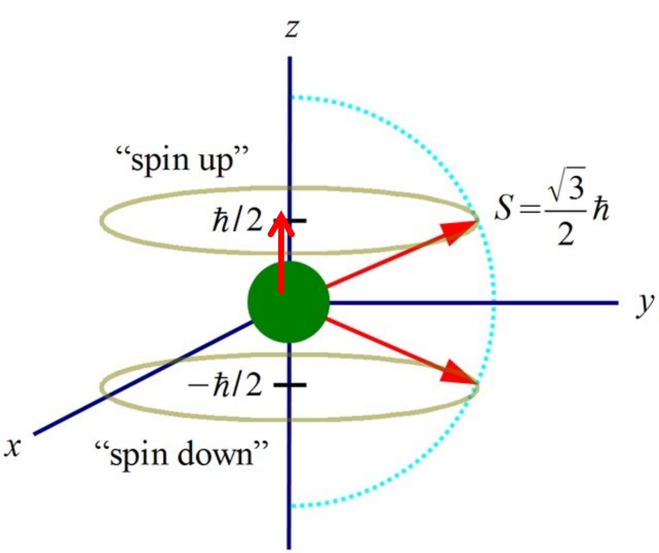
$$\boxed{\hat{S}^2\,|\uparrow\rangle = \frac{3\,\hbar^2}{4}\,|\uparrow\rangle}$$

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$ é autoestado de $\hat{S}_z$ e de $\hat{S}^2$

autoestado simultâneo dos dois operadores !

Podemos medir as duas grandezas ao mesmo tempo !

Isto acontece porque $\hat{S}_z$ e $\hat{S}^2$ são compatíveis !



Como sabemos que
eles são compatíveis ?

Porque o comutador é zero!

Verificação :

$$\hat{S}^2 = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = \frac{3\,\hbar^2}{4}\,\frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right]$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

Outro exemplo: $[\, S^2 \,,\, S_y \,]$

$$[\hat{S}^2 \,,\, \hat{S}_y] \,=\, \hat{S}^2 \hat{S}_y \,-\, \hat{S}_y \hat{S}^2$$

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

$$= \frac{3\hbar^3}{8} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{3\hbar^3}{8} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$[\, S^2 \,,\, S_y \,] \,=\, 0$$

Outro exemplo:

$$[\hat{S}_x\,,\,\hat{S}_y] = \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x$$

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

$$= \frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$= i\,\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + i\,\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= i\,\hbar\,\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\,\hbar\,\hat{S}_z$$

$$[\,S_x\,,\,S_y\,] = i\,\hbar\,S_z$$

Comutadores e operadores compatíveis

$$[\,S_x\,,\,S_y\,]\,=\,i\,\hbar\,S_z \qquad [\,S^2\,,\,S_z\,]\,=\,0$$

$$[\,S_y\,,\,S_z\,]\,=\,i\,\hbar\,S_x \qquad [\,S^2\,,\,S_y\,]\,=\,0$$

$$[\,S_z\,,\,S_x\,]\,=\,i\,\hbar\,S_y \qquad [\,S^2\,,\,S_x\,]\,=\,0$$

Não têm autoestados comuns !

Têm autoestados comuns !

Não podem ser conhecidos
ao mesmo tempo !

$$\hat{S}_x \,|\uparrow\rangle = ?$$

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

$$\hat{S}_x \,|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\downarrow\rangle$$

Não é equação de autovalores !

$|\uparrow\rangle$ não é autoestado de $\hat{S}_x$

Quando sabemos o autovalor de $\hat{S}_z$

não sabemos o autovalor de $\hat{S}_x$

Eu que inventei
essas matrizes !

Pauli