

Mecânica Quântica em 3d

- hidrogênio -

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi, \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad \Rightarrow H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad \text{com}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_n(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$$

$$e \quad \psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

normalização: $\int \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3r = 1$

$\uparrow$
 $dV, dx dy dz, r^2 dr d\Omega$

Força Central

$$\vec{F} = F(r) \hat{n} \Rightarrow \exists V / \vec{F} = -\nabla V$$

$\uparrow$
módulo

$$\Rightarrow V = -\frac{e^2}{r} \Rightarrow E \text{ se conserva}$$

$$\vec{L} = \underbrace{\vec{r}}_0 \times \vec{F} = \frac{d\vec{L}}{dt} \Rightarrow \vec{L} \text{ se conserva}$$

Pl explora a simetria ^{esférica} radial, usando coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] +$$

$$+ V \psi = E \psi$$

Soluções separáveis:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$$

Substituindo e dividindo por ψ :

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} (V - E) +$$

por equação
uma ψ

$$+ \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0$$

∴, tem $f(r) + g(\theta, \phi) = 0 \Rightarrow f(r) \equiv l(l+1)$
e $g(\theta, \phi) \equiv -l(l+1)$

1) Eg. angular

multiplicada por $Y \sin^2 \theta$ resulta em

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) \sin^2 \theta \cdot Y$$

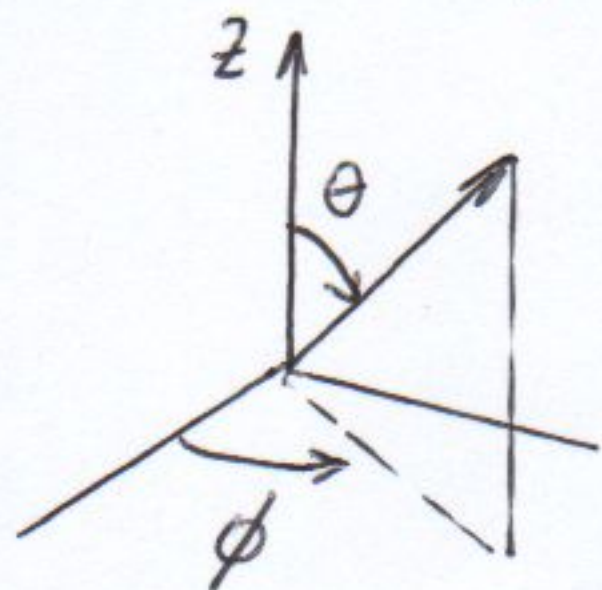
Solução separável: $Y(\theta, \phi) = g(\theta) \cdot f(\phi)$

Subst. e dividido por Y :

por equação
cte ψ

$$\left(\frac{1}{g} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta \right) = \frac{-1}{f} \frac{d^2 f}{d\phi^2} \equiv m^2$$

A Eq. em ϕ : $\frac{d^2 f}{d\phi^2} = -m^2 f \Rightarrow \underline{f = e^{im\phi}}$



impondo $f(\phi + 2\pi) = f(\phi)$

$\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$\bar{n}$ convém, jé que
 $|f|$ $\bar{n}$ depende de m ;
 a álgebra de mom.
 angular exige m
 inteiro

2) A Eq. em θ :

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] g = 0$$

Essa é difícil! ver Butkov, Cap. 9, 9.5 e 9.8
 Arfken, Cap. 12

$\forall l \forall$, $g(\theta)$ exibirá divergências em $\theta = 0$ ou π .

Não há razão, em M. Quântica, M solução desse tipo.

1) l inteiro: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ as soluções sã
 regulares sempre que $m = \text{inteiro}$ e $|m| \leq l$.

Em geral, $P(\theta) = A P_{lm}(\cos \theta)$, com

$$P_{lm}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

$\uparrow$

função associada
 de Legendre

$\uparrow$

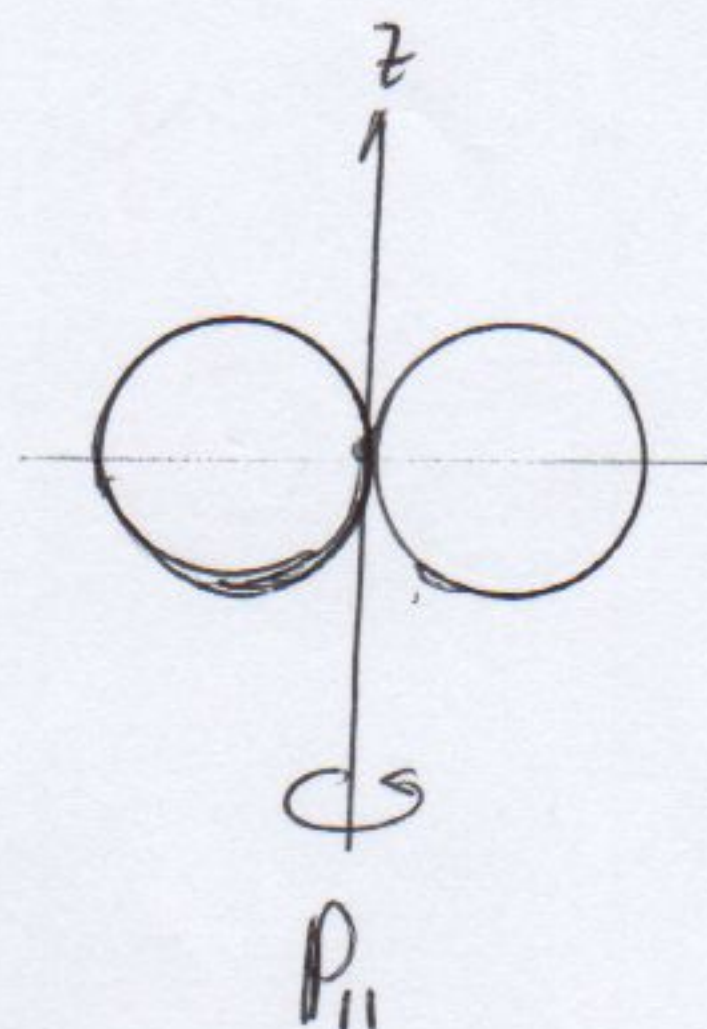
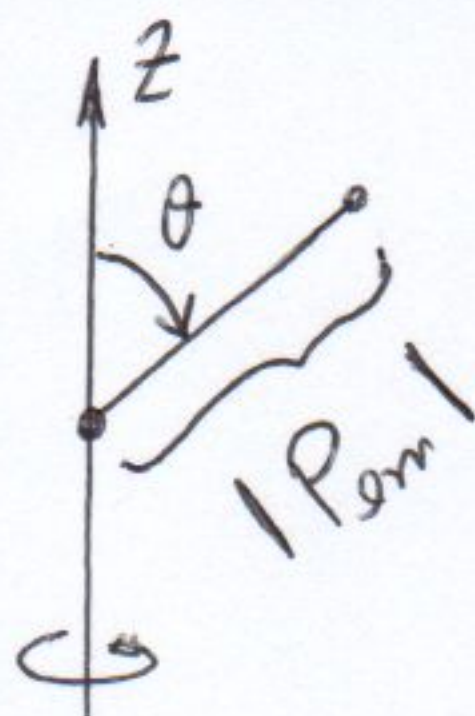
polinômio
 de Legendre:
 grau l , paridade l

Q. $P_0 = 1$, $P_1 = x$, $P_2 = \frac{3x^2 - 1}{2}$

$P_{00} = 1$, $P_{1\pm 1} = \sin\theta$, $P_{10} = \cos\theta$

($\bar{n}$ confundir com orbitais)

desenhando:

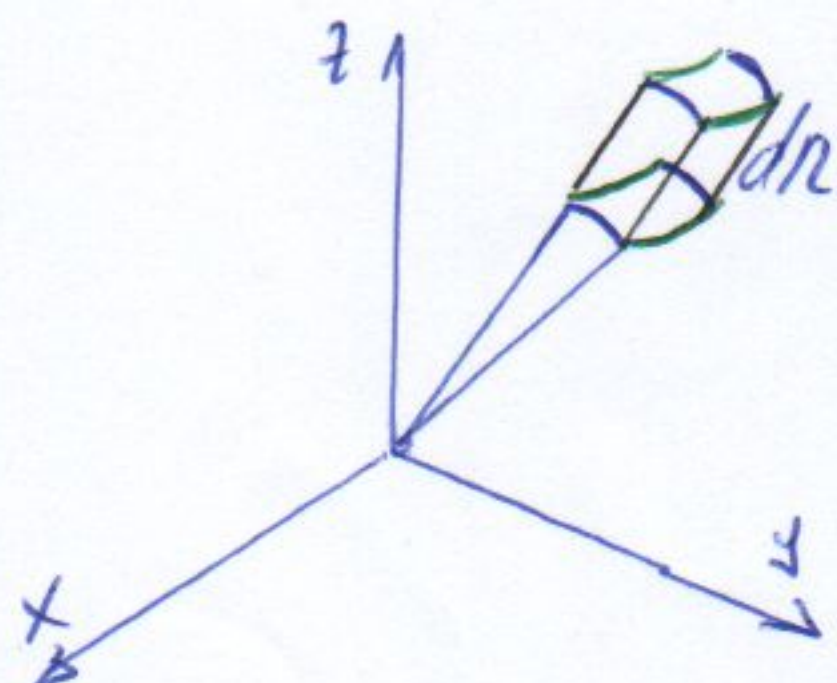
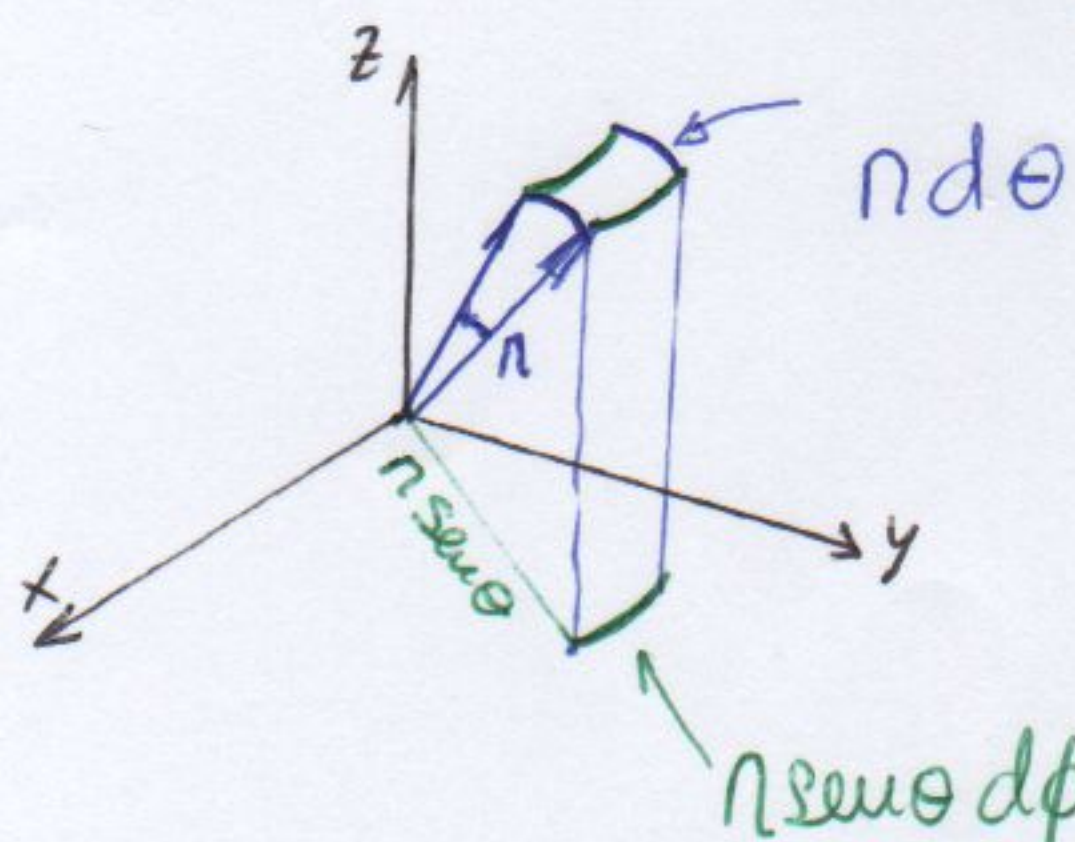


Lembrando:

$Y_{lm}(\theta, \phi) = A P_{lm}(\theta) e^{im\phi}$, l inteiro, $|m| \leq l$.

Normalizando:

$1 = \int |\psi|^2 dV$



$da = r \sin\theta d\phi \cdot r d\theta = r^2 d\Omega$

$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$: ângulo sólido

$dV = dr \cdot da = r^2 dr d\Omega$

$1 = \underbrace{\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr}_{=1} \cdot \underbrace{\int_\Omega |Y_{lm}|^2 d\Omega}_{=1}$

Y_{lm} normalizados: harmônicos esféricos:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

fácil
de ver, é qm $\int d\Omega = 4\pi$.

ortogonalidade: $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{lm}|^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1$

normaliza q

$(\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'})$
 $\langle lm | l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{l'm'} \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

completa: $\sum_{l,m} Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta', \phi') = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\phi - \phi')$

$$\Rightarrow f(\theta, \phi) = \sum_l \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

propriedade: $Y_{lm}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \phi)$

2 - Parte radial $V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (4\pi\epsilon_0 = 1)$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V - E) = l(l+1)$$

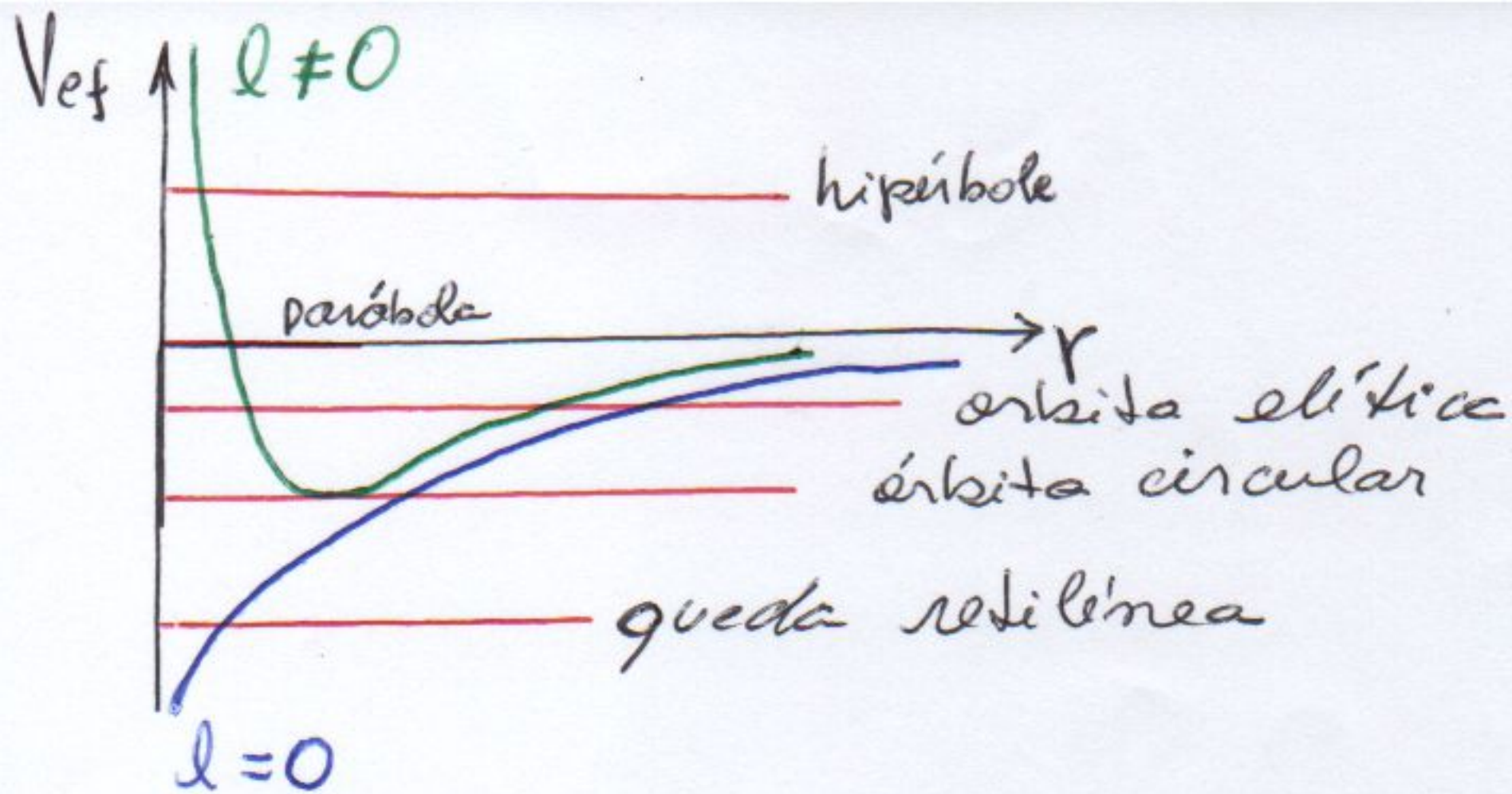
Multiplica por R e troca R por $u(r)/r$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{\text{ef}} u = E u$$

Eq. Schr.
em 1d
(radial)

onde $V_{\text{ef}} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}$

$\nearrow r$



Quilómetros
estado ligado,
logo, $E < 0$

• Mudando p/ Variáveis adimensionais:

$$-E \equiv +\frac{\hbar^2 K^2}{2m} \Rightarrow K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \text{ real, e y dimensão de } 1/\text{comprimento}$$

Definir $\hbar$ $\rho = K \cdot r$, adimensional.

$$\text{realiza } \frac{2me^2}{\hbar^2 K} \equiv \rho_0$$

Assi, ficamos com
$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u = 0$$

Seguimos o
método de Frobenius:

1) comportamento assintótico em $\rho \rightarrow \infty$:

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = u \Rightarrow u = A e^{-\rho} + B e^{\rho}$$

"0, por diverge"

2) comportamento em $\rho \rightarrow 0$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$$

propomos $u = \sum_j C_j \rho^j$. Subst. encontramos

$$\sum_j C_j j(j-1) \rho^{j-2} = l(l+1) \sum_j C_j \rho^{j-2}, \quad \forall \rho \Rightarrow$$

$$\Rightarrow j(j-1) = l(l+1) \Rightarrow \begin{cases} j = -l, \text{ ou } \text{okandoverna} \\ j = l+1 \end{cases}$$

Sol. convergente e' $u = \rho^{l+1}$

Pnto, proponho como soluç

$$u(\rho) = A \rho^{l+1} e^{-\rho} \cdot f(\rho)$$

Subst. encontramos

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{df}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1)) f = 0$$

Propomos $f(\rho) = \sum_q C_q \rho^q$

Subst.

$$\begin{aligned} \sum_q C_q q(q-1) \rho^{q-2+1} + 2(l+1) \sum_q C_q q \rho^{q-1} - \\ - 2 \sum_q C_q q \rho^q + (\rho_0 - 2(l+1)) \sum_q C_q \rho^q = 0 \end{aligned}$$

reduzindo os termos a mesma potência em ρ :

$$\begin{aligned} \sum_{q=0} C_q q(q-1) \rho^{q-1} &= \sum_{q=1} C_q q \cdot (q-1) \rho^{q-1} \xrightarrow{q \rightarrow q+1} \\ &= \sum_{q=0} C_{q+1} (q+1) q \rho^q \end{aligned}$$

$$\sum_{q=0} q C_q \rho^{q-1} = \sum_{q=1} C_q q \rho^{q-1} = \sum_{q=0} C_{q+1} (q+1) \rho^q$$

Então,

$$\sum_{q=0}^{\infty} \left(C_{q+1} q(q+1) + 2(l+1)(q+1) C_{q+1} - 2q C_q + (p_0 - 2(l+1) C_q) p^q \right) = 0, \quad \forall p \Rightarrow$$

$$\underline{C_{q+1} = \frac{2(q+l+1) - p_0}{(q+1)(q+2l+2)} C_q.}$$

Dado C_0 , calculo $C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow C_3 \rightarrow \dots$

Verso

$$\text{P/ } q \text{ gde, } C_{q+1} \sim \frac{2}{q} C_q$$

$$\text{ou } C_q \sim \frac{2}{q} C_{q-1} = \frac{2}{q} \cdot \frac{2}{q-1} C_{q-2} = \frac{2}{q} \frac{2}{q-1} \frac{2}{q-2} C_{q-3} \dots$$

$$\Rightarrow C_q \sim \frac{2^q}{q!} C_0$$

$$\text{Ent, } f(p) \sim C_0 \sum_q \frac{2^q}{q!} p^q = C_0 e^{2p}$$

$$\therefore, u(p) \sim p^{l+1} e^{-p} e^{2p} \rightarrow \sim e^p \text{ diverge.}$$

*tudo que n
queríamos!*

Estratégia:

Se o numerador de C_{q+1} zerar num certo q ,

digamos, $q_{\max}$, aí, $C_{q_{\max}+1} = 0 \Rightarrow C_{q_{\max}+2} = 0 \dots$ e

a série viraria uma soma, que certamente perde
fuerde a $e^{-p} \Rightarrow$ convergência!

Então, seja $l_{\max} / 2(l_{\max} + l + 1) - l_0 = 0$
 $\equiv m$

$$\Rightarrow 2 \cdot M = l_0 \Rightarrow 2M = \frac{2me^2}{\hbar^2 R} \Rightarrow R_m = \frac{me^2}{\hbar^2 M} = \frac{1}{M a_0}$$

$$\Rightarrow E_m = -\frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 m^2} = -\frac{E_1}{m^2} \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Bohr!

$E_1 \sim 13.6 \text{ eV}$

$l_{\max}$ pode ser no mínimo 0; l no mínimo 0

$\Rightarrow M$ é no mínimo 1. com

Função de onda radial

$$\frac{C_{q+1}}{C_q} = \frac{2(q+l+1-m)}{(q+1)(q+2l+2)}$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} = \frac{r^{l+1}}{r} e^{-\rho} \sum_{q=0}^{l_{\max}} C_q \rho^q, \quad \rho = k \cdot r$$

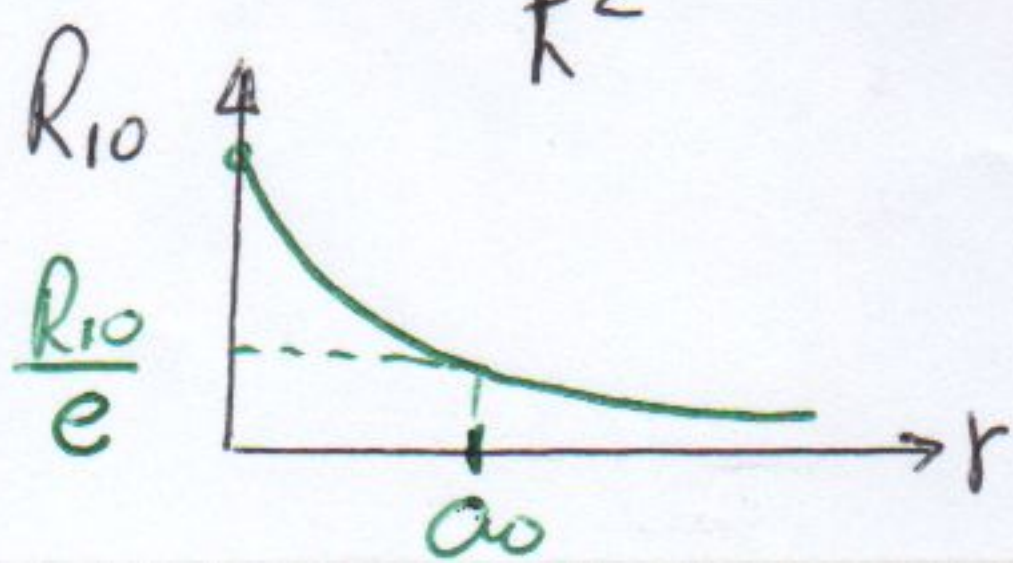
$$\Rightarrow R_{me}(r) = k_n^{l+1} r^l e^{-k_n r} \sum_q C_q (k_n r)^q \quad \text{verso}$$

Para cada M e l , $\exists m$ $l_{\max} : l_{\max} = M - l - 1$.

Estado Fundamental: $M = 1 \Rightarrow l = 0$ e $l_{\max} = 0$

$$\Rightarrow R_{10} = k_1^2 r^0 e^{-k_1 r} C_0 = C_0 k_1^2 e^{-k_1 r}$$

$$k_1 = \frac{me^2}{\hbar^2} \equiv 1/a_0 \quad \rightarrow \quad R_{10} = \frac{C_0}{a_0} e^{-r/a_0}$$



$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2} : \text{raio de Bohr}$$

normaliza ψ : $1 = \int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr \Rightarrow C_0 = 2/\sqrt{a_0}$

$$\Rightarrow R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

then $\psi_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, $\rightarrow \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

$\begin{matrix} & \uparrow & \uparrow \\ & l & m \end{matrix}$

1º excitedo : $N = 2$

$$E_2 = -\frac{E_1}{4} , \rho = K_2 R = \frac{R}{2a_0}$$

$$2 = n_{\max} + l + 1$$

a) $l=0$ e $n_{\max}=1$
 $\downarrow$
 $m=0$

$$R_{20} = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^2 r^0 e^{-r/2a_0} \left(C_0 + C_1 \frac{r}{2a_0}\right)$$

then, $\frac{C_1}{C_0} = \frac{2(0+0+1-2)}{(0+1)(0+0+2)} = -1 \rightarrow R_{20} = \frac{C_0}{2a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$

normaliza C_0 / $1 = \int_0^\infty |R_{20}|^2 r^2 dr \Rightarrow C_0 = \sqrt{2/a_0}$

$$\Rightarrow R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{200} = R_{20} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$b) \quad l = 1 \quad \text{e} \quad q_{\max} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$m = 0, \pm 1 \quad R_{21} = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^2 r^2 e^{-r/2a_0} \cdot C_0 = \frac{C_0}{4a_0^2} e^{-r/2a_0}$$

$$C_0 / 1 = \int_0^\infty |R_{21}|^2 r^2 dr \Rightarrow R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{21}^{\pm 1} = R_{21} \cdot y_1^{\pm 1} = \frac{\pm 1}{\sqrt{32\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cdot \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{210} = R_{21} y_{10} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cdot \cos \theta$$

Recita p1 e 2º excitado

$$m = 3 \Rightarrow 3 = q_{\max} + l + 1$$

$$\Downarrow$$

$$l = 0, 1 \text{ ou } 2$$

$$a) \quad l = 0, \quad q_{\max} = 2 \Rightarrow e^{-r/3a_0} (C_0 + C_1(k, r) + C_2(k, r)^2)$$

$$b) \quad l = 1, \quad q_{\max} = 1$$

$$c) \quad l = 2, \quad q_{\max} = 0$$

$$\rho = k_3 r = \frac{r}{3a_0}$$

$$\deg = 9 \quad (= 3^2)$$

dens. radial de prob.

$$1 = \int_0^1 |R|^2 r^2 dr \equiv \int P(r) dr$$

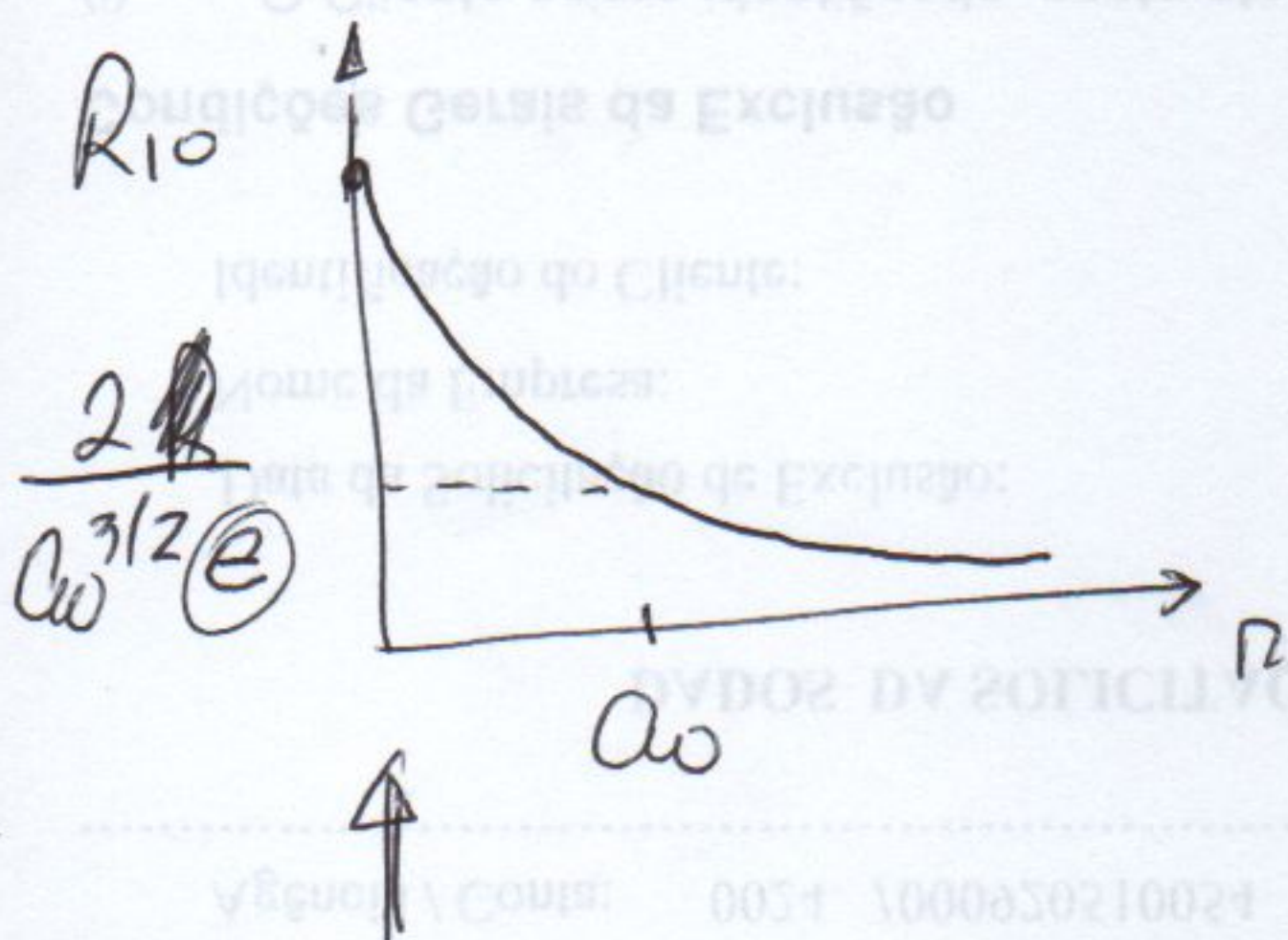
$$P(r) = |R|^2 r^2 : \text{dens. prob.}$$

$P \cdot dr$ = probab. de se achar o e^- entre r e $r+dr$.
indp. do ângulo.

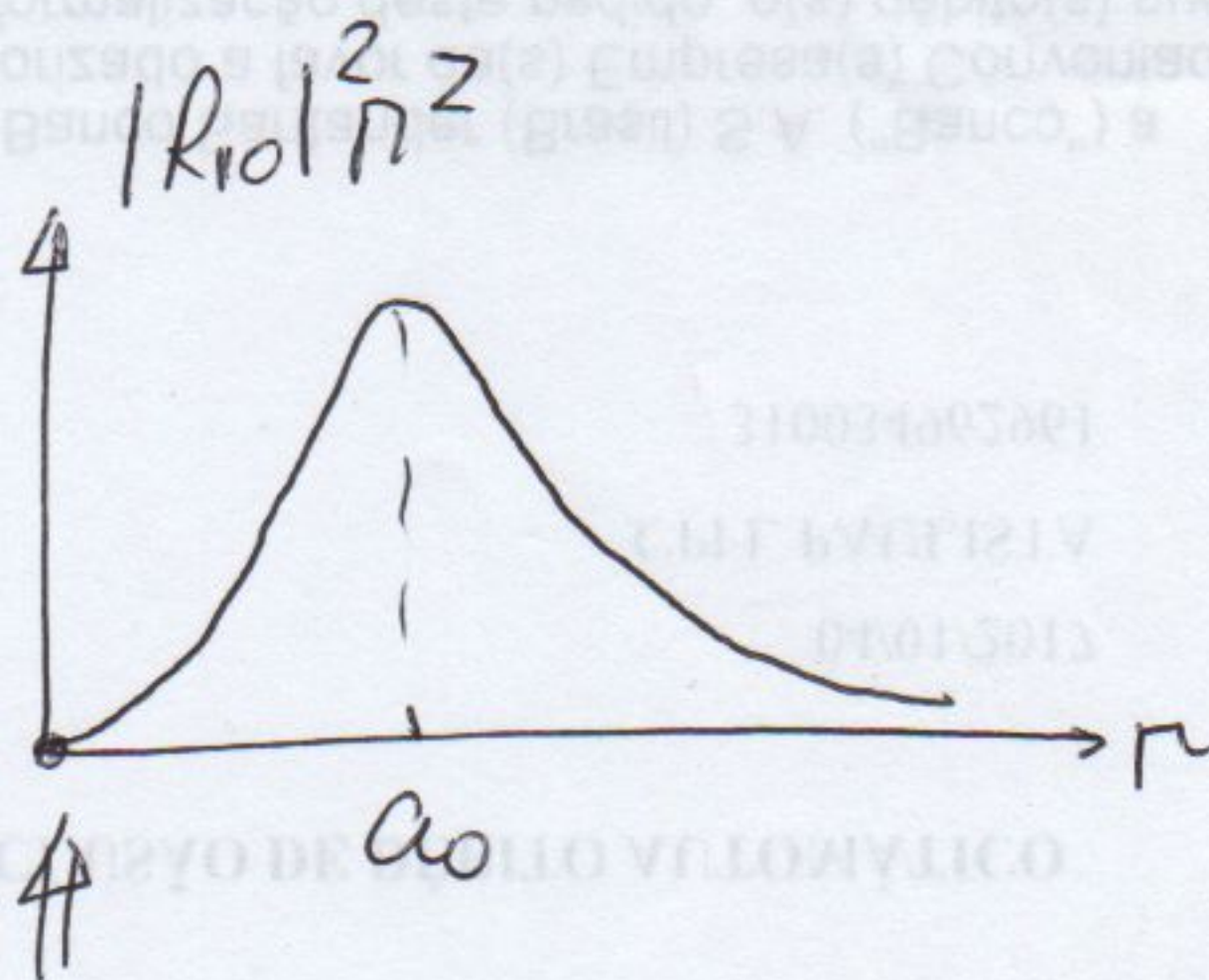
9x. Qual a prob. de achar o e^- entre 0 e R_0 :
norm. fund.?

$$\int_0^{R_0} |R_{10}|^2 r^2 dr = \int_0^{R_0} \left| \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \right|^2 r^2 dr = \dots$$

Gráfico: $R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$

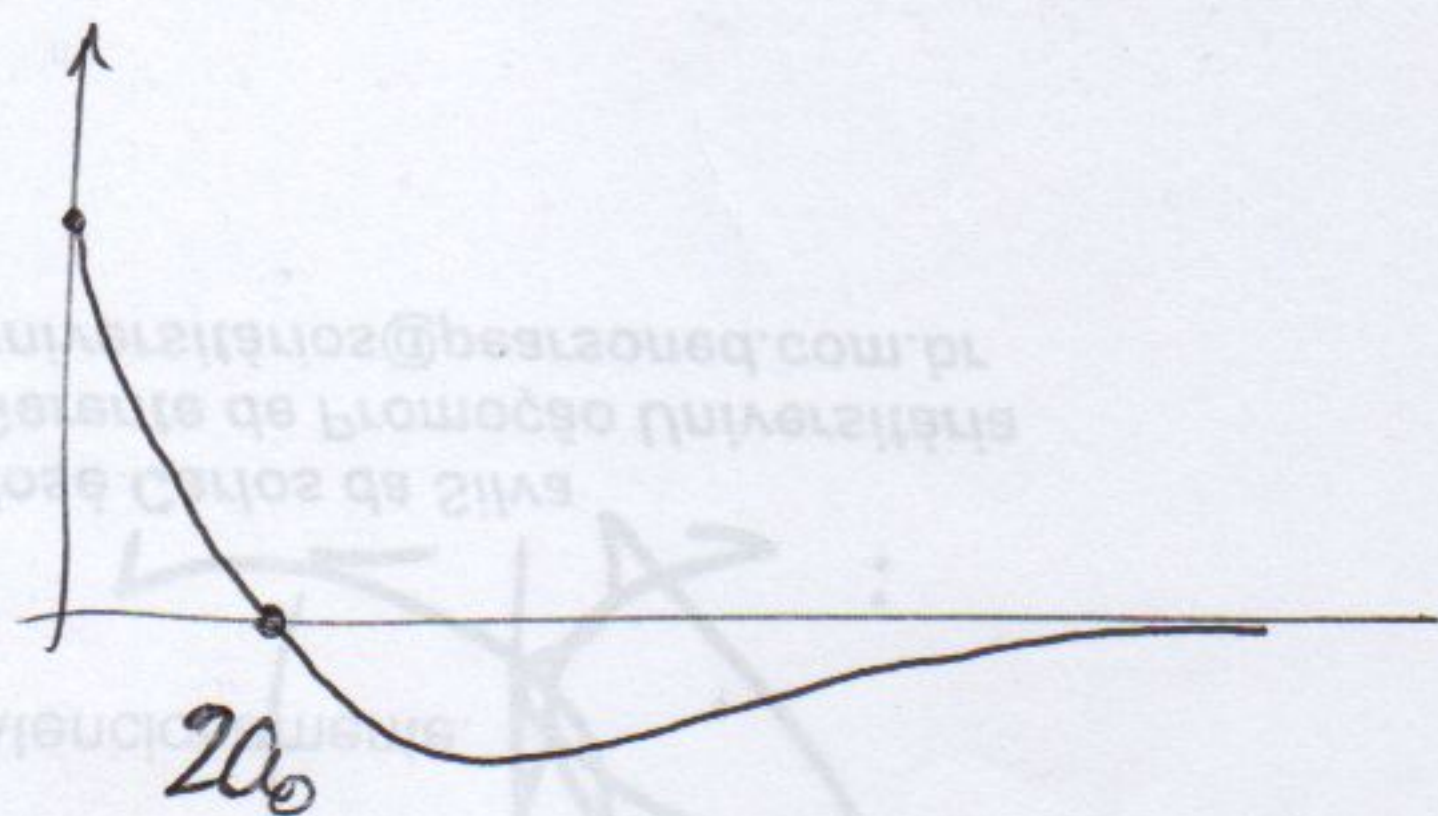


$\neq 0$ em $r=0$

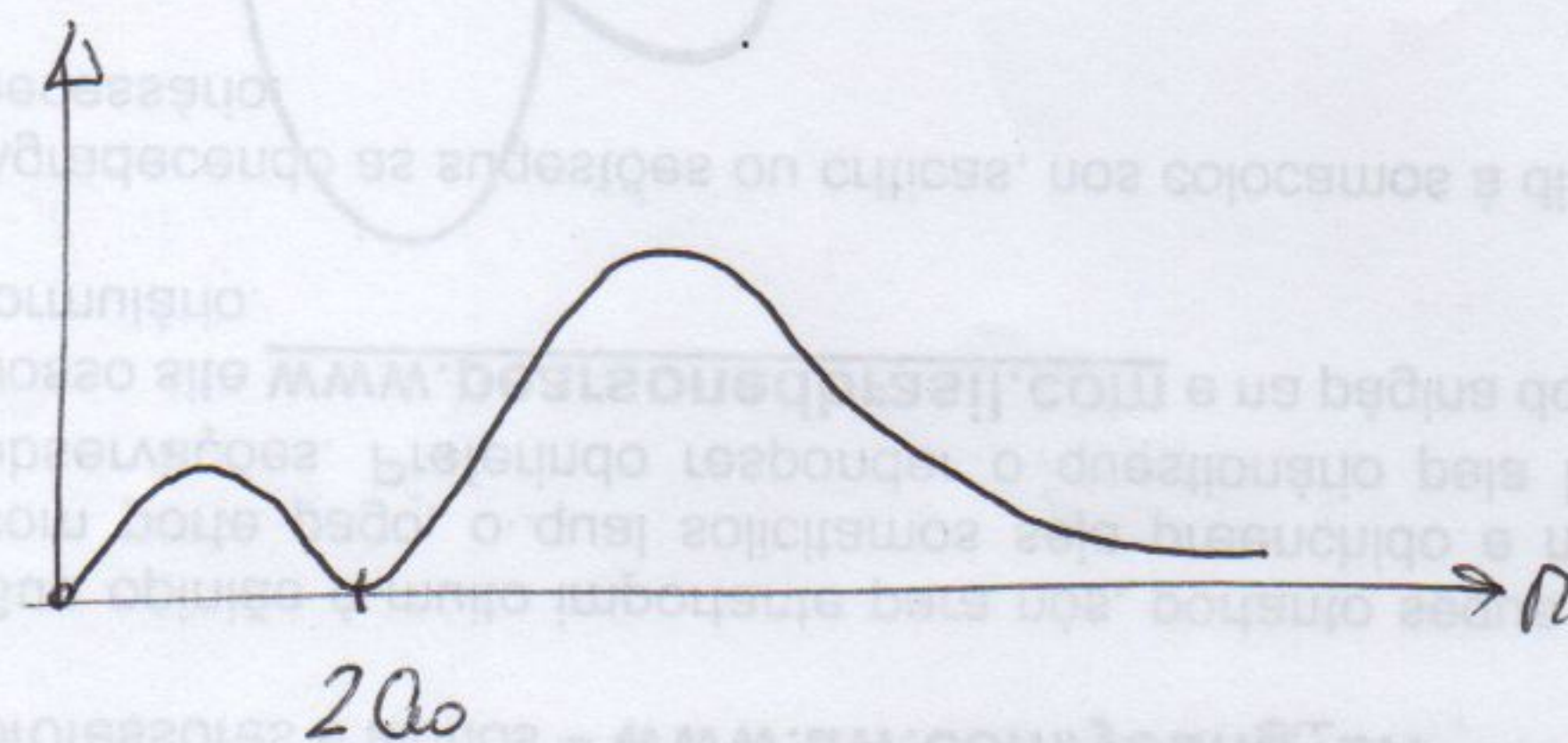


muda em $r=0$

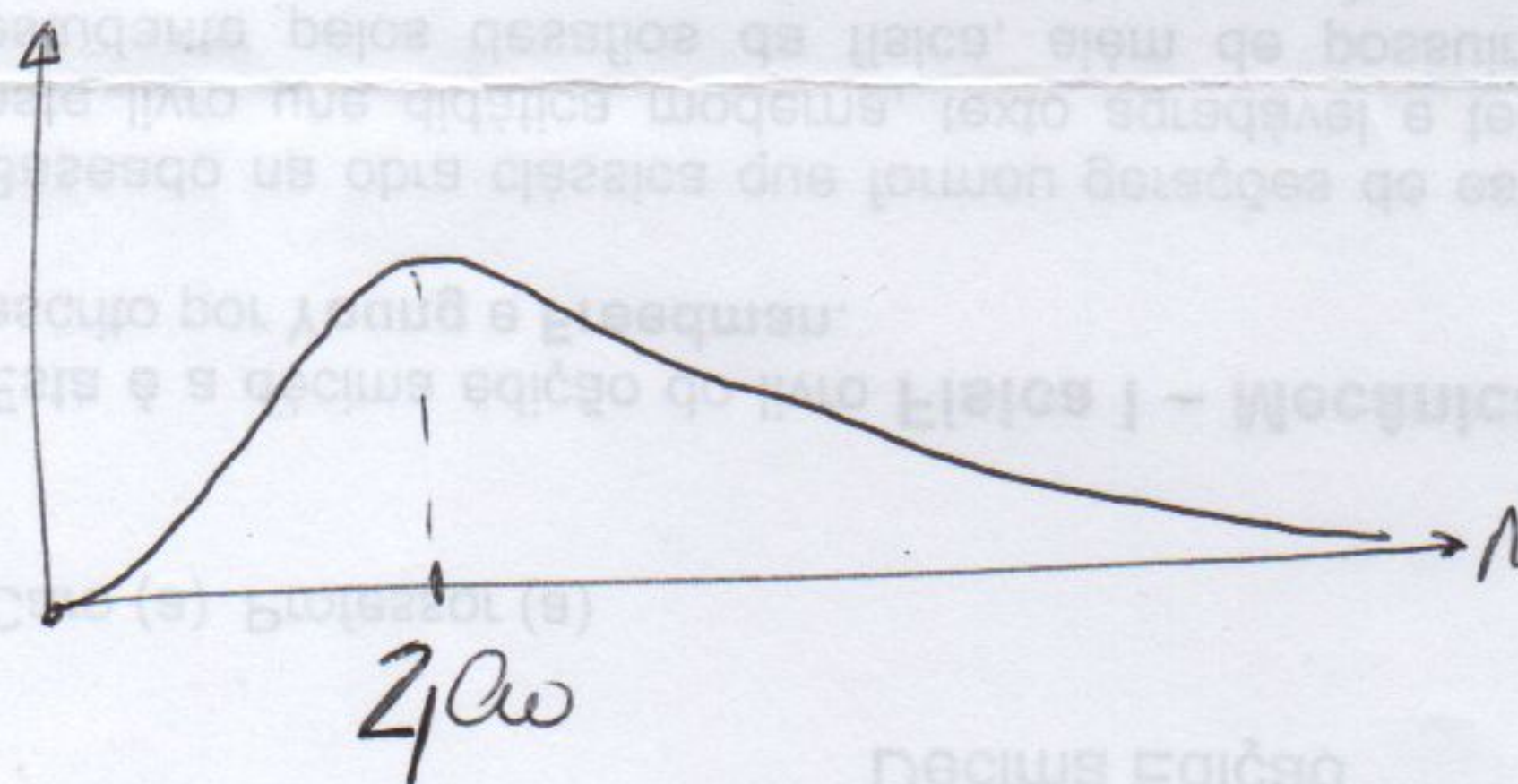
$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2} a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{n}{2a_0} \right) e^{-n/2a_0}$$



$$|R_{20}|^2 n^2$$

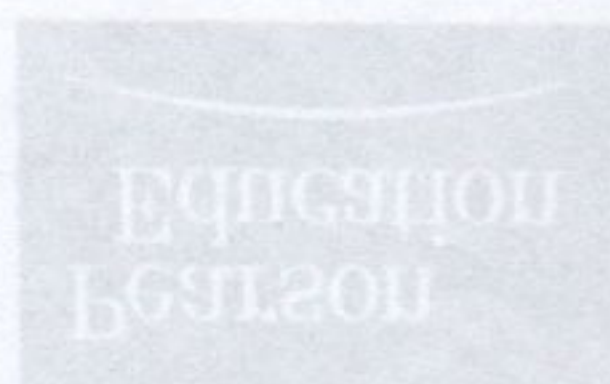


$$|R_{21}|^2 n^2$$



$|R_{m, \ell=m-1}|^2 n^2$ tem máximo em $n^2 a_0$,
igual a Bohr!

São Paulo, Novembro de 2005



Wilton Books
Longman
Addison Wesley
Prentice Hall

Hidrogênio - versão curta

$$4\pi\epsilon \equiv 1$$

$$H\psi = E\psi, \quad V(r) = -e^2/r$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} (V - E) = \frac{1}{Y} \frac{L^2 Y}{\hbar^2} \equiv l(l+1),$$

onde o op. L^2 só depende de θ e ϕ :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$

Assim, $L^2 Y = \hbar^2 l(l+1) Y$

veja que a unidade de L^2 é $\hbar^2$.

Soluções $Y(\theta, \phi)$ regulares somente p/ $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = A_{lm} P_{lm}(\theta) e^{im\phi}, \quad \text{c/ } |m| \leq l.$$

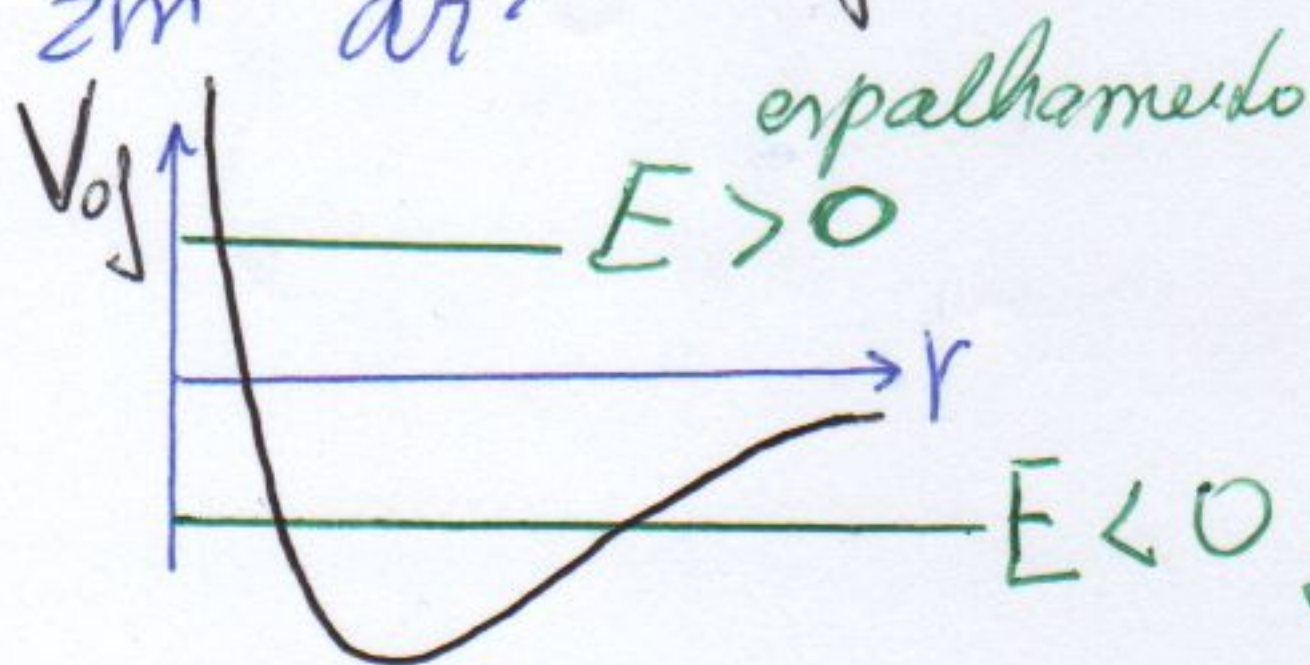
$\uparrow$
função associada de Legendre

$$P_{00} = 1, \quad P_{10} = \cos\theta, \quad P_{1,\pm 1} = \sin\theta$$

Parte radial

Multiplico por R e troco R por u/r :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{\text{ef}} u = E u \quad : \quad \text{Eq. Sch. em 1d na variável } r$$



$$V_{\text{ef}} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$E < 0 \Leftarrow$ estado ligado

mudança de variável:
 $p \equiv k \cdot r$, $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

Frobenius: $u(p) = A \cdot p^{l+1} \cdot e^{-p} \sum_{q=0}^{\infty} C_q p^q$

comportamento $p \rightarrow \infty$ comportamento para $p \rightarrow 0$ $\uparrow$ esperamos soma convergente!

Subst. encontramos

$$C_{q+1} = \frac{2(q+l+1) - p_0}{(q+1)(q+2l+2)} \quad , \quad p_0 = \frac{2me^2}{\hbar^2 k}$$

$\forall q \gg 1, C_{q+1} \sim \frac{2}{q} C_q \Rightarrow C_q \sim \frac{2^q}{q!} C_0 \Rightarrow \sum C_q p^q \sim e^{2p}$

$\therefore u \sim e^{-p} e^{2p} \sim e^p \rightarrow \text{diverge!}$ tudo que $\tilde{u}$ queremos!

Mas, se p um certo q , denominado $q_{\max}$,
 acontecer de $2(q_{\max} + l + 1) - p_0 = 0$

$$\Rightarrow C_{q_{\max}+1} = 0 \Rightarrow C_{q_{\max}+2} = 0 \Rightarrow \dots$$

e a série se torna uma soma $\Rightarrow$ converge!
 e $\tilde{u}$ deixa de ser selvagem!

denotando $q_{\max} + l + 1$ por n :

$$2 \cdot n = p_0 \Rightarrow K_n = \frac{2me^2}{\hbar^2 \cdot 2n}$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

Bohr

$$n = q_{\max} + l + 1$$

$\uparrow$ no mínimo 0

$\uparrow$ no mínimo 0

$$\Rightarrow n = 1, 2, 3, \dots$$

$$De \quad l = m - q_{max} - 1$$

↑
o maior
valor e' 0

o maior valor de
l e' m - 1

$$\Rightarrow l = 0, 1, 2, \dots, m - 1$$

Estado fundamental : $m = 1$

$$m = 1 \Rightarrow E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13.6 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$$

$$\Rightarrow q_{max} = m - l - 1 = 0$$

$$\Rightarrow u = A \rho e^{-\rho} \quad , \quad \rho = k_1 \cdot r$$

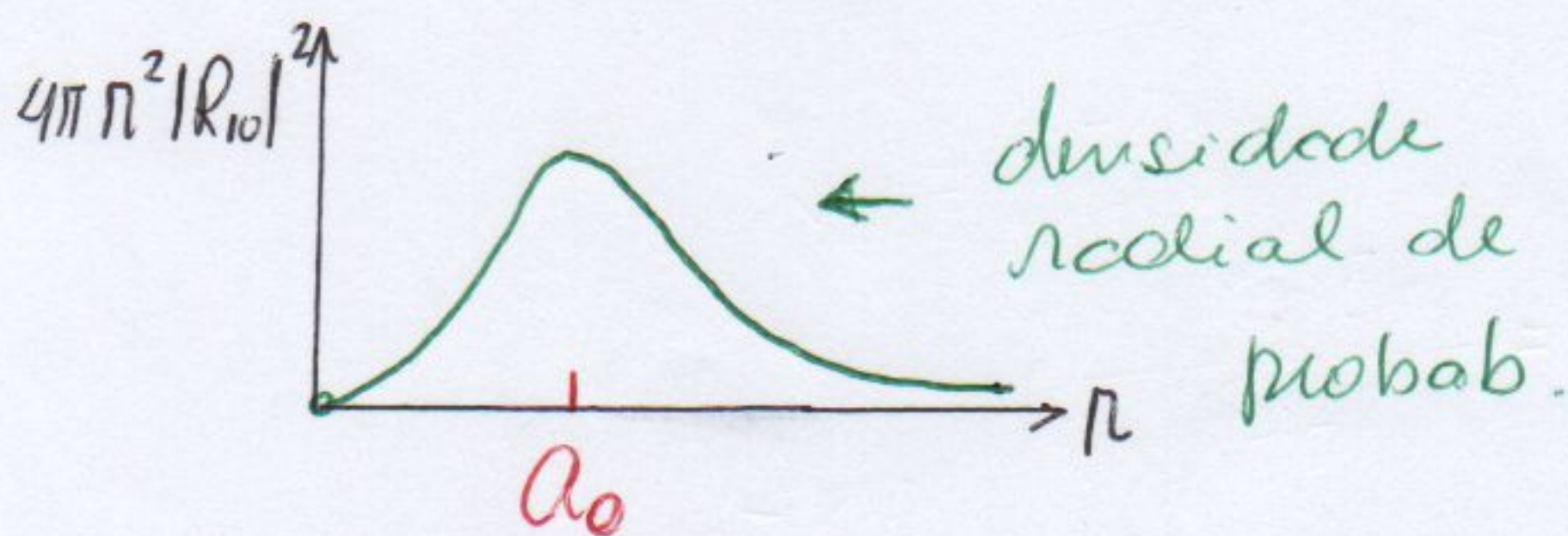
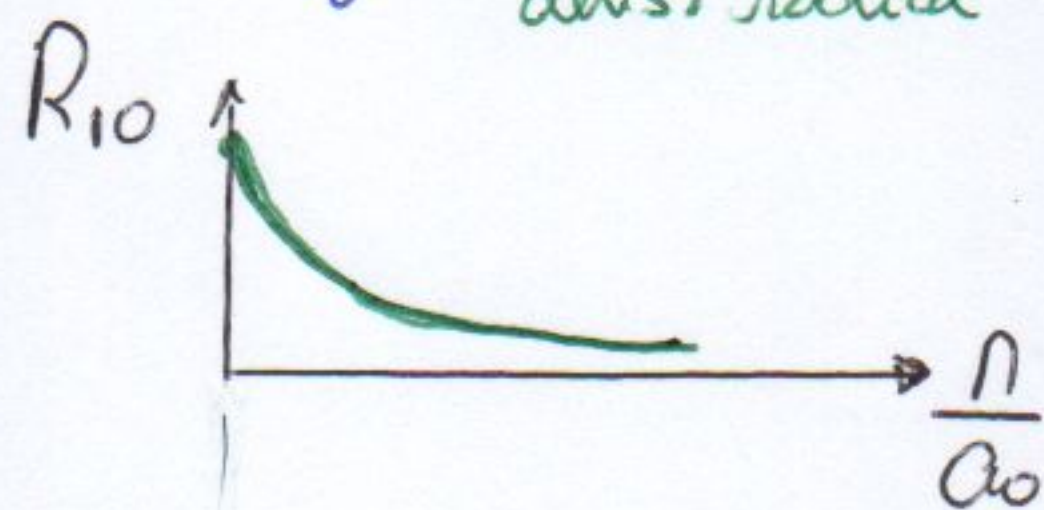
$$k_1 = \frac{\sqrt{-2mE_1}}{\hbar} = \frac{me^2}{\hbar^2} \equiv \frac{1}{a_0}$$

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\Rightarrow R(r) = \frac{u}{r} = \frac{C_0}{a_0} e^{-r/a_0}$$

$$\Rightarrow R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

$$1 = \int_0^\infty \underbrace{|R_{10}|^2 r^2 dr}_{\text{dens. radial}} \Rightarrow C_0 = 2/\sqrt{a_0}$$



a_0 : raio de Bohr

$$\psi_{100} = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

n
 l
 m

Em geral, $\psi_{n\ell m} = A_{n\ell} \underbrace{P_{\ell}(\frac{r}{a_0})}_{\text{proporcional ao polinômio associado de Laguerre}} e^{-r/na_0} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

proporcional ao polinômio associado de Laguerre

$$\int \psi_{n\ell m}^* \psi_{n'\ell'm'} r^2 dr d\Omega = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Espectro

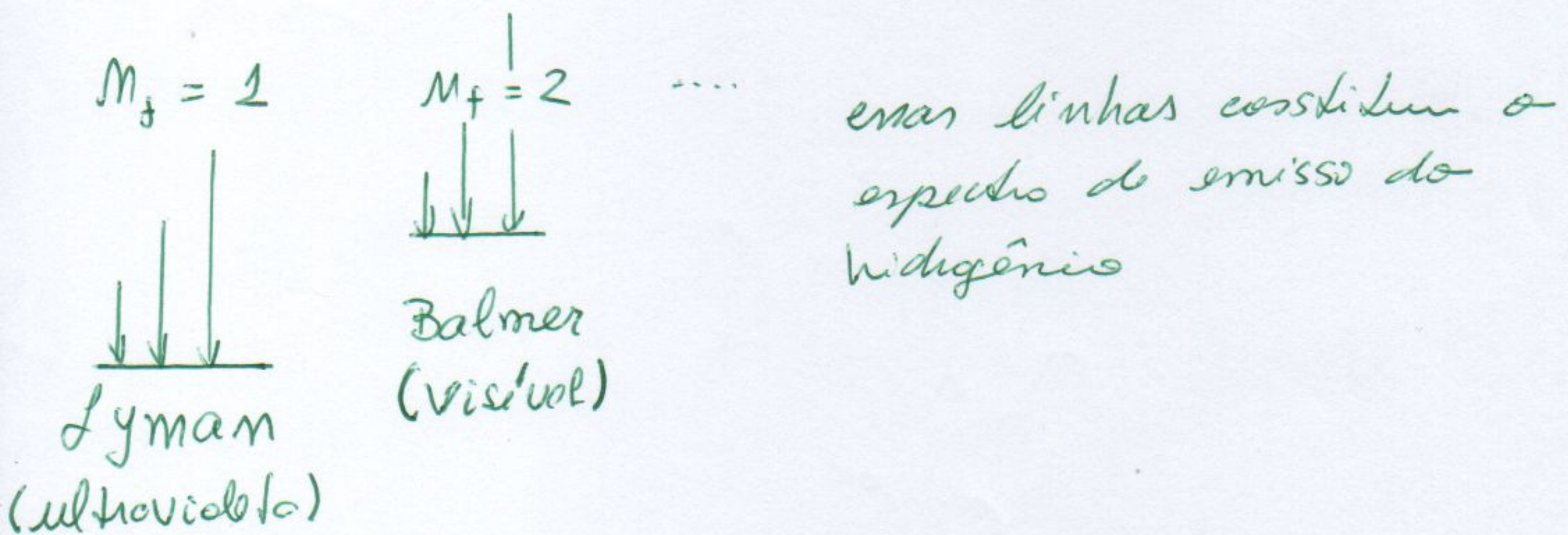
(níveis)

(transições)

$\Delta E = h\nu, \nu = \frac{c}{\lambda}$
 $\Downarrow$
 $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{M_f^2} - \frac{1}{M_i^2} \right)$

Rydberg

com $R = \frac{m e^4}{4\pi \hbar^3 \epsilon} \sim 10^7 \text{ cm}^{-1}$



correções: massa finita do próton $\Rightarrow m \rightarrow \mu = \frac{mM}{m+M}$

$\Rightarrow E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} \sim -\frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \approx -\frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} \left(1 - \frac{1}{1836}\right)$

e^-
 M Ze hidrogenóide

Operador momento angular

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$\Rightarrow \vec{L} = (y p_z - z p_y) \hat{i} + (z p_x - x p_z) \hat{j} + \overbrace{(x p_y - y p_x)}^{L_z} \hat{k}$$

$L = p_z y$, já que $[y, p_z] = 0$

Queremos achar o espectro de autovalores de $\vec{L}$,
baseados apenas nas relações de comutação.

$$\underline{[L_x, L_y] = i\hbar L_z}, \text{ e permutas cíclicas,}$$

logo, $\nexists$ base comum ^{desses} operadores. a ordem das medidas
faz diferença

Mas, de $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ vê-se que

$$\underline{[L^2, L_i] = 0}, \quad \forall i = x, y \text{ ou } z.$$

∴ $\exists$ base comum a L^2 e L_z : na escolha

$$L^2 f = \lambda \hbar^2 f \quad \text{e} \quad L_z f = \mu \hbar f$$

$$\lambda > 0: \quad \hookrightarrow \int f^* L^2 f d\Omega = \lambda \hbar^2 \int f^* f d\Omega = \lambda \hbar^2$$

$$\hookrightarrow \int (\vec{L} f)^* \cdot \vec{L} f d\Omega = \int (\underbrace{\vec{L} f}_*)^* \cdot \underbrace{\vec{L} f}_* d\Omega > 0$$

norma: $\int f^* f d\Omega = 1$

Definiremos operadores exata: $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$

$$\Rightarrow [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad (1) \quad , \quad [L^2, L_{\pm}] = 0 \quad (2)$$

veja que $L_+^+ = L_-$

a) $L_{\pm} f$ é autofunção de L^2 :

$$L^2(L_{\pm} f) \stackrel{(2)}{=} L_{\pm} L^2 f = L_{\pm} \lambda \hbar^2 f = \lambda \hbar^2 (L_{\pm} f)$$

e com o mesmo autovalor $\lambda \hbar^2$ de L^2 .

b) $L_{\pm} f$ tb é autofunção de L_z :

$$L_z(L_{\pm} f) \stackrel{(1)}{=} (\pm \hbar L_{\pm} + L_{\pm} L_z) f = \pm \hbar L_{\pm} f + L_{\pm} \hbar \mu f$$

$$= \hbar (\mu \pm 1) (L_{\pm} f)$$

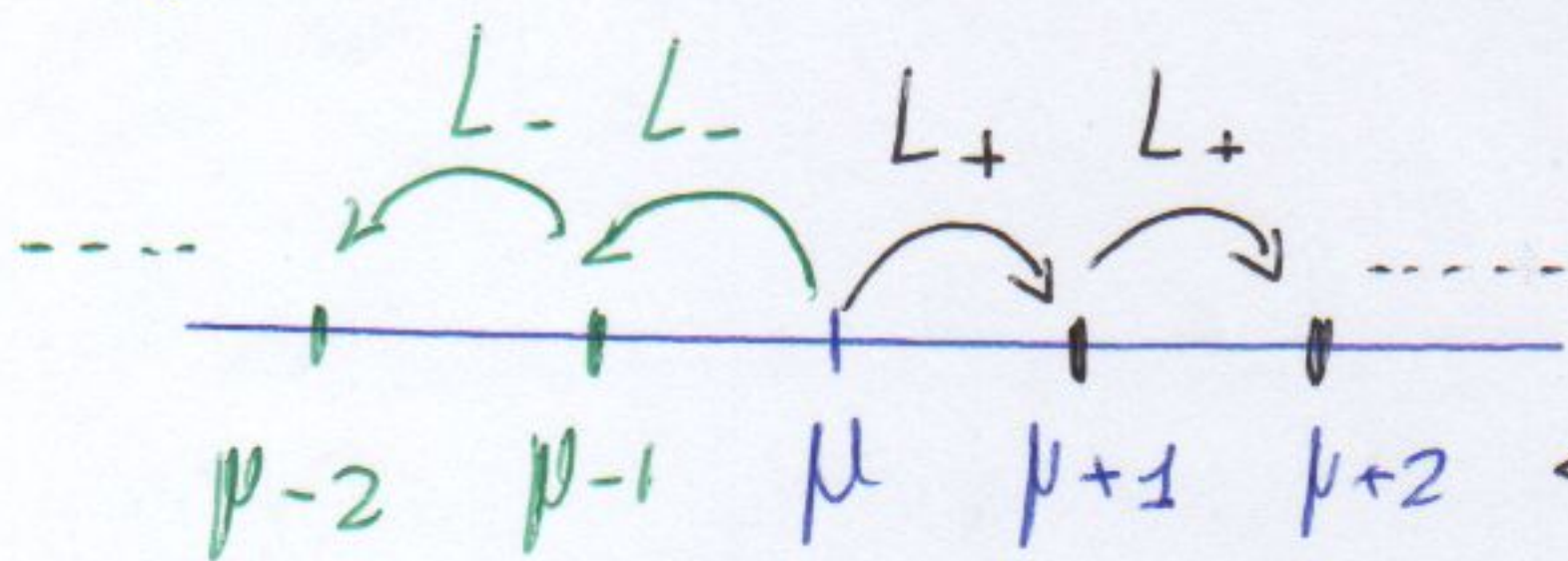
levantamento

Então,

$L_+ f$ é autofunção de L_z com autovalor $\mu + 1$

$L_- f$ " " " " " " $\mu - 1$

abaixamento



autovalores de L_z
todos com o mesmo λ .

Será que $\exists$ limites superior e inferior p/ uma excda?
Sim!

Vamos precisar dos produtos:

$$L_+ L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 + i(L_x L_y - L_y L_x)$$

$$\Rightarrow L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$$

Os autovalores de $L_+ L_-$, ou de $L_- L_+$, são positivos, uma vez que $L_+ L_- = L_-^\dagger L_- \equiv A^\dagger A$.
 Então, p/ f autovetor de L^2 e L_z e com autovalores λ e μ , temos que

$$L_+ L_- f = (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z) f = \hbar^2 (\lambda - \mu^2 + \mu) f$$

$$\Rightarrow \lambda \geq \mu(\mu - 1) \quad (\text{I})$$

$$L_- L_+ f = (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) f = \hbar^2 (\lambda - \mu^2 - \mu) f$$

$$\Rightarrow \lambda \geq \mu(\mu + 1) \quad (\text{II})$$

|| cada λ, μ deve satisfazer ambas as desigualdades. || facilitar, vamos escrever λ

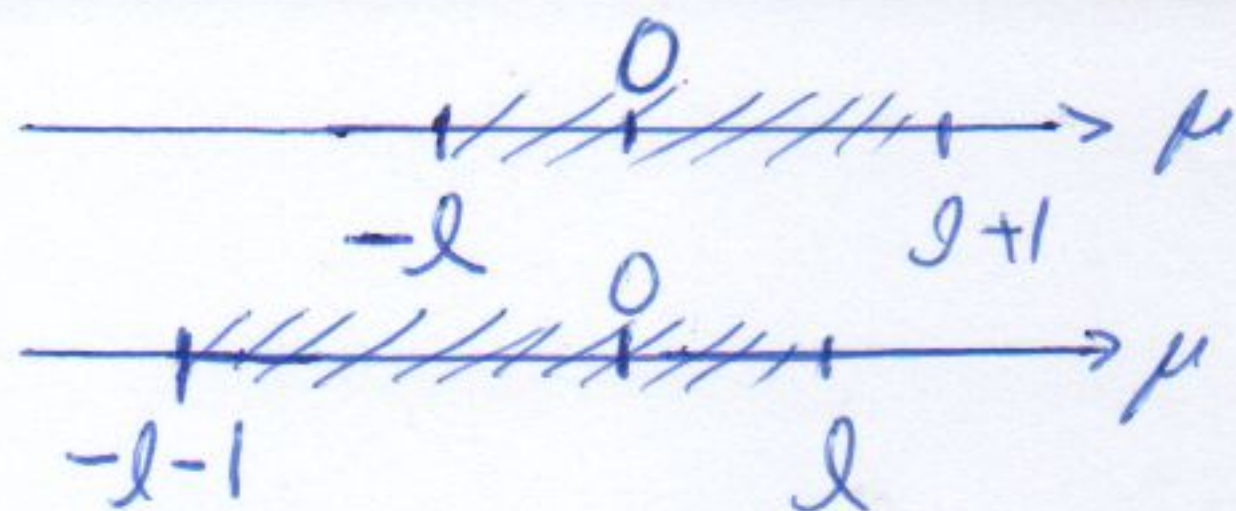
como $\lambda \equiv l(l+1)$

Como $\lambda \geq 0 \Rightarrow \underline{l \geq 0}$ ou $\underline{l \leq -1}$

Vu escolher trabalhar com $l > 0$, ou com $l < -1$.
 É muito mais prático escolher $l \geq 0$!

Então, (I) $\Rightarrow l(l+1) \geq \mu(\mu-1) \Rightarrow -l \leq \mu \leq l+1$

(II) $\Rightarrow l(l+1) \geq \mu(\mu+1) \Rightarrow -l-1 \leq \mu \leq l$



$$\Rightarrow \underline{-l \leq m \leq l}$$

Mas o "polo" deve ser de 1 em 1; começando em l (ou em $-l$) e devendo parar em $-l$ (ou l) de 1 em 1 só é possível se

$$\underline{l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots}$$

Então, $L^2 f_{lm} = l(l+1)\hbar^2 f_{lm}$

$$L_z f_{lm} = m\hbar f_{lm} \quad , \quad |m| \leq l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

Tb vimos que $L_{\pm} f_{lm}$ é autovetor de L_z com autovalor $m \pm 1$:

$$L_{\pm} f_{lm} = \alpha_{\pm} f_{l, m \pm 1}$$

Necessariamente, $L_+ f_{l, l} = 0$ e $L_- f_{l, -l} = 0$.

Mais a frente calcularemos $\alpha_{\pm}$.

e $L_+ Y_{l,m} = \alpha_+ Y_{l,m+1}$ uma vez que $L_+ Y_{l,m}$ é autofunç de L_z com autovalor $m+1$.

Então,

$$(L_+ Y_{l,m})^* = \alpha_+^* Y_{l,m+1}^*$$

$$\Rightarrow \int d\Omega (L_+ Y_{l,m})^* (L_+ Y_{l,m}) = \alpha_+^* \alpha_+ \int Y_{l,m+1}^* Y_{l,m+1} d\Omega = 1$$

$$\Rightarrow |\alpha_+|^2 = \int d\Omega Y_{l,m}^* L_+^\dagger L_+ Y_{l,m} = \int d\Omega Y_{l,m}^* \underbrace{L^2 - L_z^2 - \hbar L_z}_{= L^2 - L_z^2 - \hbar L_z} Y_{l,m} =$$

$$= \int d\Omega Y_{l,m}^* (l(l+1) - m^2 - m) \hbar Y_{l,m}$$

$$= (l(l+1) - m^2 - m) \hbar$$

$$\Rightarrow \alpha_+ = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \hbar$$

$$\underline{L_\pm Y_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{l,m \pm 1}}$$

Note que, como deveria, $L_+ Y_{l,0} = 0$
e $L_- Y_{l,-l} = 0$

deu seg, $\bar{n}$ de m subir ou de l , e nem descer abaixo de $-l$!

achando $Y_{l,m}$
verso

Achando $Y_{\ell\ell}$

$$Y_{\ell m} = P_{\ell}(\theta) e^{im\phi}, \quad F_{\ell\ell} \sim P_{\ell m}(\theta)$$

$$L_+ = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{dF_{\ell\ell}}{d\theta} - \ell \cot \theta F_{\ell\ell} = 0 \Rightarrow \frac{dF_{\ell\ell}}{F_{\ell\ell}} = \ell \cot \theta$$

$$\int \frac{dF}{F} = \ell \int \cot \theta d\theta = \ell \int \frac{\cos \theta d\theta}{\sin \theta} = \ell \int \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta}$$

$$\Rightarrow \ln F_{\ell\ell} = \ell \ln \sin \theta$$

$$\Rightarrow F_{\ell\ell} = C_{\ell} \sin^{\ell} \theta$$

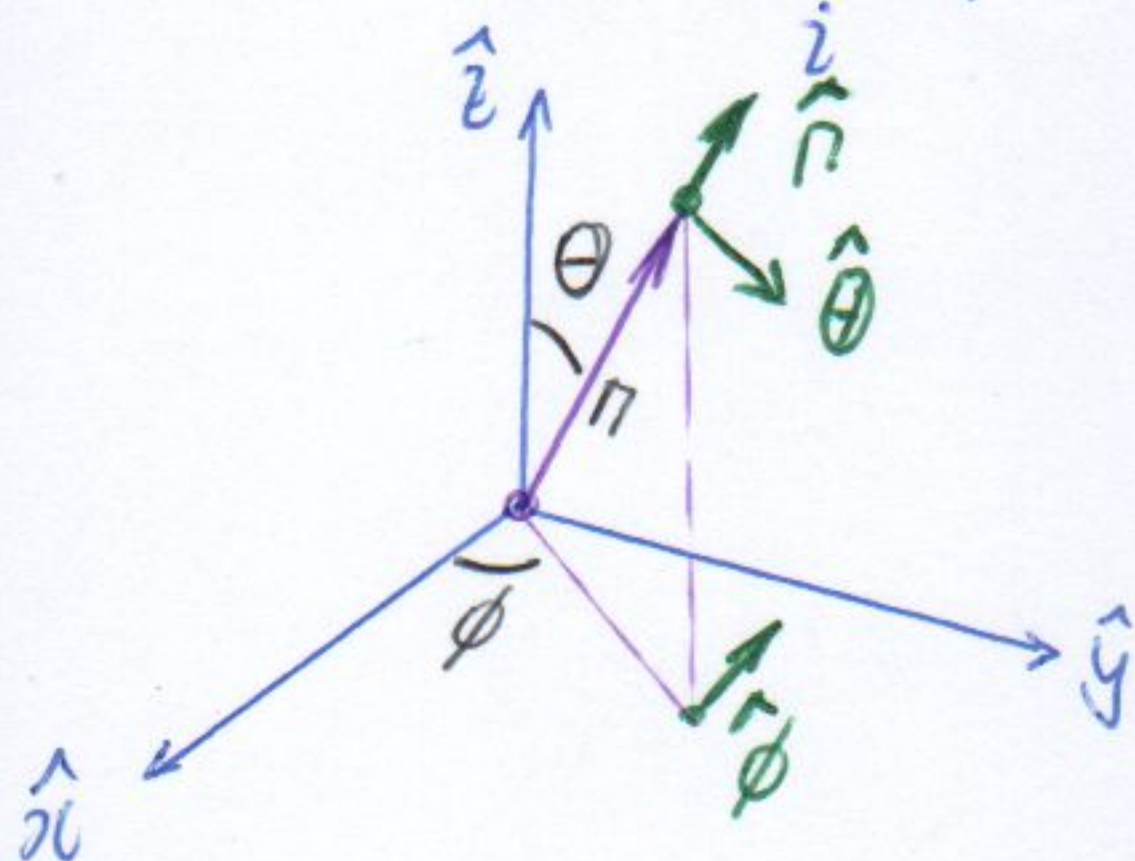
$$\Rightarrow \underline{Y_{\ell\ell} = C_{\ell} \sin^{\ell} \theta e^{i\ell\phi}}$$

$$L_- Y_{\ell, \ell} = \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell(\ell-1)} \hbar Y_{\ell, \ell-1} = \sqrt{2\ell} \hbar Y_{\ell, \ell-1}$$

podemos obter $Y_{\ell, \ell-1}$.

l inteiro $\Rightarrow$ harmônicas esféricas

$$\vec{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \left(\hat{n} \times \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\phi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$



$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{\theta} = \cos \theta (\cos \phi \hat{i} + \sin \phi \hat{j}) - \sin \theta \hat{k} \\ \hat{\phi} = -\sin \phi \hat{i} + \cos \phi \hat{j} \\ \hat{n} = \sin \theta (\cos \phi \hat{i} + \sin \phi \hat{j}) + \cos \theta \hat{k} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \vec{L} = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} ; L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Da álgebra, L^2 e L_z tem autofunções comuns; as regulares têm o nome $Y_{lm}(\theta, \phi)$:

$$L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} , L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm} \quad e$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad |m| \leq l.$$

Incertezas

- cálculo de incertezas no autoestado de L^2, L_z

$$Y_{lm} \rightarrow |Y_{lm}\rangle \rightarrow |l, m\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle_y &= \langle l, m | L_z | l, m \rangle = m \hbar \\ \langle L_z^2 \rangle_y &= \langle l, m | L_z^2 | l, m \rangle = m^2 \hbar^2 \end{aligned} \Rightarrow \Delta L_z = 0$$

claro!

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2} \quad e \quad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2}$$

- $\langle L_x \rangle_{lm} = 0 \quad e \quad \langle L_y \rangle_{lm} = 0$

$L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + L_z \hbar$

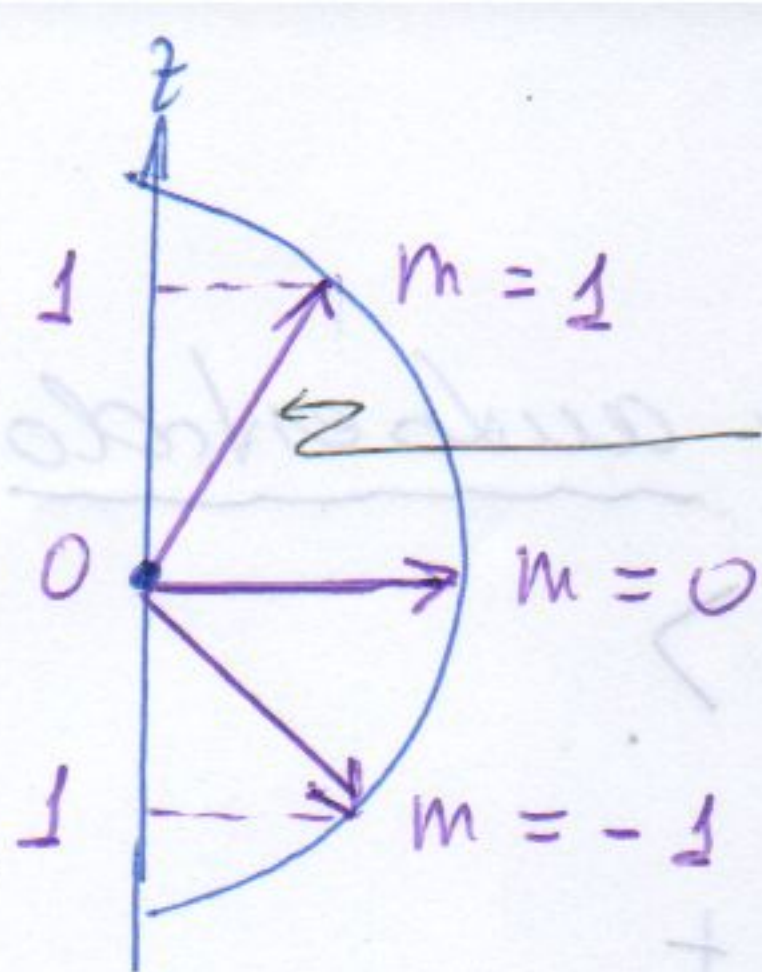
- $$\begin{aligned} \langle L_x^2 \rangle_{lm} &= \frac{1}{4} \langle l, m | L_+^2 + L_-^2 + L_+ L_- + L_- L_+ | l, m \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \langle l, m | L_+ L_- + L_- L_+ | l, m \rangle = \frac{1}{4} \langle l, m | 2L^2 - 2L_z^2 | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} (l(l+1) - m^2) \hbar^2 \end{aligned}$$

$$\langle L_y^2 \rangle_{lm} = \frac{1}{2} (l(l+1) - m^2) \hbar^2$$

$$\Rightarrow \Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{l(l+1) - m^2}$$

- a incerteza é mínima p/ $m = l \Rightarrow \hbar \sqrt{\frac{l}{2}}$
- a incerteza é máxima p/ $m = 0 \Rightarrow \hbar \sqrt{\frac{l(l+1)}{2}}$

Imagem $\rightarrow$ verso

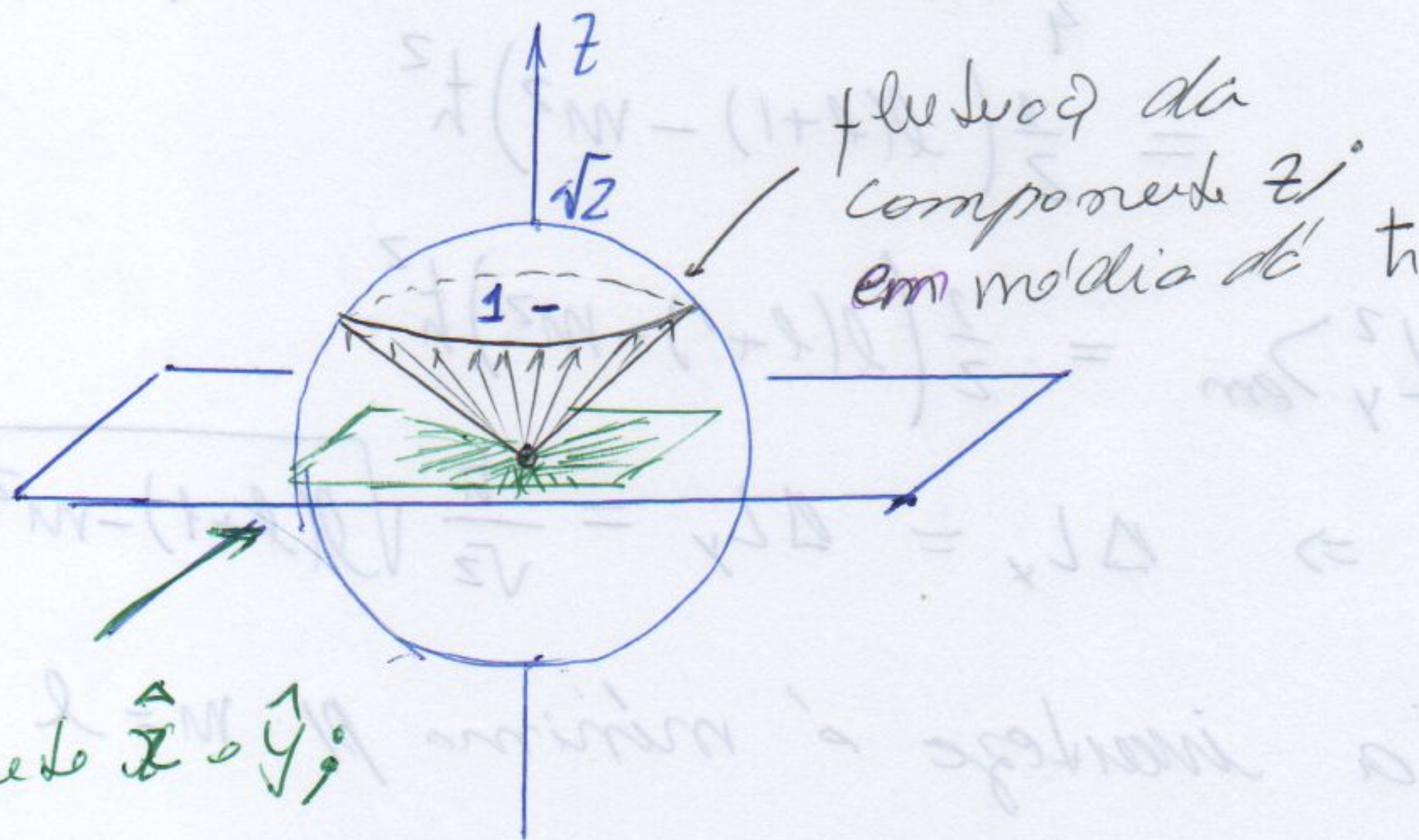


$$l = 1 \Rightarrow m = 0, \pm 1$$

$$\text{módulo} = \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{2} > 1$$

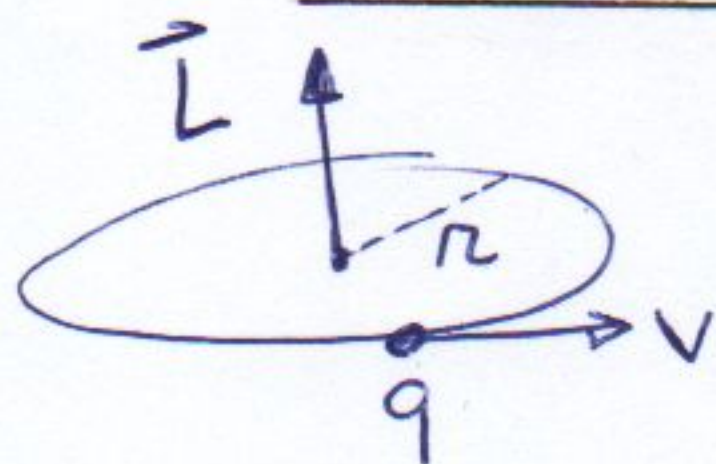
a componente z nunca
toma o maior valor, ou,
o vetor nunca "deita" no
eixo!

Isso é consequência do princípio de
incerteza: se a componente z fosse $\hbar$, ou,
se o vetor pudesse "deitar" no eixo z , saberíamos
que as duas outras componentes seriam zero.
Mas nós não podemos saber simultaneamente ψ_z
duas componentes - não vez que $[L_x, L_y] \neq 0$.



flutuação
das componentes x e y ;
em média se
anulam.

momento magnético orbital



$$L = m r v$$

$$i = \frac{q}{T} = \frac{q v}{2 \pi r}$$

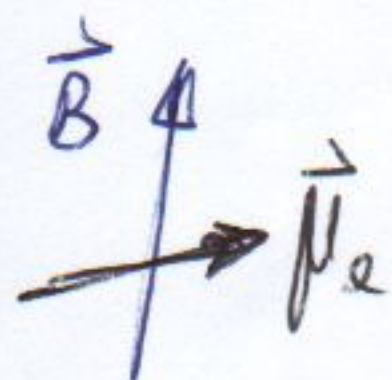
$$\mu_L = i A = \frac{q v}{2 \pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{q}{2 m} L$$

$$\underline{\vec{\mu}_L = \frac{q}{2 m} \vec{L}}, \quad q = -e \text{ p/ elétion.}$$

quantiza $\Rightarrow$ possíveis valores de μ sã:

$$\mu_L = \frac{e}{2 m} \sqrt{l(l+1)} \hbar \equiv \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad \mu_B \equiv \frac{e \hbar}{2 m} \sim 10^{-9} \text{ eV/gauss}$$

Ent, $\vec{\mu}_L = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \Rightarrow \mu_{Lz} = \mu_B m_L, |m_L| \leq l.$



$$\underline{U = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}}$$

Zeeman

Spin

$$\underline{\vec{\mu}_S = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}}$$

q/ $g_s = 1$



factor geomagnético orbital

Onde ele foi necessário?

Efeito Zeeman normal: sempre duas linhas,

(ver Tipler, cap. 7, pg. 209)

não importa o l do sã'da e o do chã'da*; Mas sem

casos em que aparecem outros números de transiç: anômalo

* $|\Delta m| = 0, 1$

No hidrogênio, os seus transições são proibidas:

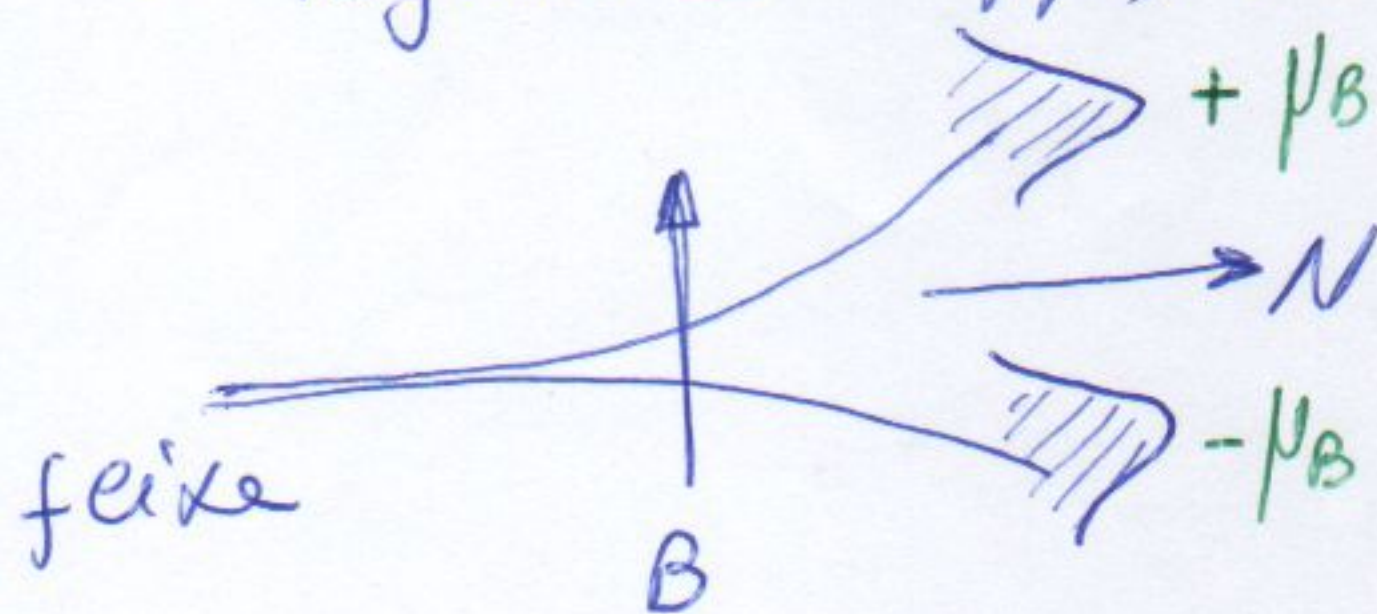
- Pl. Bohr, energia depende de n somente
 - Sommerfeld tinha órbitas elípticas, mas mesmo assim, a energia só depende de n
 - Sommerfeld torna relativisticamente, e a energia depende de n e l
- Ver Eiseberg, Cap. 5, pg. 149.
- ou, apenas + linhas, com boa concordância experimental, Mas, prevê ~~apenas~~ linhas que não existem!

• Pauli sugeriu, em 1925, a existência de um quarto número quântico, intrínseco ao elétron.

• Goudsmit e Uhlenbeck propuseram que seja um momento angular intrínseco, mas com apenas duas componentes: $2S+1=2 \Rightarrow \underline{S=1/2}$.

• Isso explicou os experimentos de

- Stern-Gerlach (1922) com íons de Ag
- Taylor e Phipps, (1927) com feixe de H.



apenas 2 resultados

$$\mu_z = \pm \mu_B$$

$$2S+1=2 \Rightarrow S=1/2 : \text{ o elétron tem spin } 1/2$$

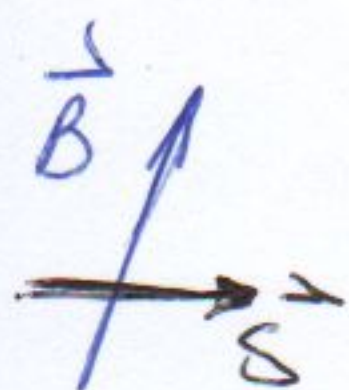
Colocando no mesmo formato do $\vec{p}_e$:

$$\mu_{sz} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} m_s, \quad \text{q} \quad m_s = \pm 1/2$$

da experiência, $g_s \sim 2,002319 \approx 2$

em L,

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}, \quad \mu_{sz} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} S_z$$



$g_s \sim 2$, fator geomagnético de spin

$$\underline{U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}}$$

Zeeman

(Ado orbital, $L^2 Y_{lm} = l(l+1) \hbar^2 Y_{lm}$ e $L_z Y_{lm} = m \hbar Y_{lm}$)

notação $Y_{lm}(\theta, \phi) \rightarrow |l, m\rangle$

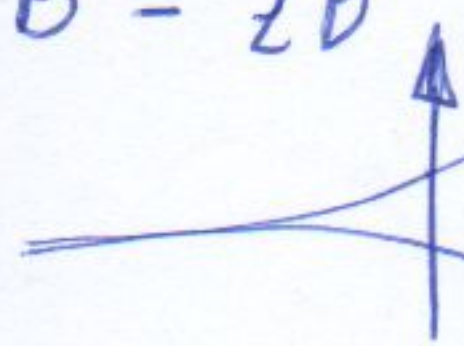
Como indicar os estados de spin?

Não temos func tipo r, θ, ϕ , já que o índice é

Semi-inteiro.

Vamos recorrer ao experimento:

$$\vec{B} = \hat{z} B$$



spin p/ "cima": $|\uparrow\rangle$ ou $|1/2\rangle$ ou $|+\rangle$ ou χ_+

spin p/ "baixo": $|\downarrow\rangle$ ou $|-1/2\rangle$ ou $|-\rangle$ ou χ_-



base: tem todos os possíveis
resultados p/ spin $1/2$

Em b, a base é $\{ |1/2\rangle, |-1/2\rangle \} \equiv \{ |m_s\rangle \}$

(Se fosse p/ um spin $s \neq 1/2$, indicá-lo-amos $|\Lambda, m_s\rangle$)

Queremos achar um operador S_z tal que seus autovalores sejam $\pm \frac{1}{2} \hbar$:

$$S_z |1/2\rangle = \frac{\hbar}{2} |1/2\rangle \quad \text{e} \quad S_z |-1/2\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-1/2\rangle$$

Na base $\{ |1/2\rangle, |-1/2\rangle \}$ ele é diagonal:

repr. Matricial

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$$

Diagonalizando: $\frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2}$, claro!

autovetores: $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda_+ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\lambda_- \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

spinors

Então, uma nova maneira de representar o estado do spin é

$$|1/2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |-1/2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Operador S^2

Da algébrica, $S^2 |\pm 1/2\rangle = s(s+1) \hbar^2 |\pm 1/2\rangle$, q/ $s = 1/2$, $\therefore$

$$= \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm 1/2\rangle$$

Propenho $S^2 = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix}$. Ento,

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow a = 3\hbar^2/4 \text{ e } c = 0$$

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow b = 3\hbar^2/4 \text{ e } c = 0$$

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

observe que,
realment,
 $[S^2, S_z] = 0$.

$$\Rightarrow S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1}, \quad \mathbb{1} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

Tb sabemos que $S_{\pm} |S, m_s\rangle = \sqrt{S(S+1) - m_s(m_s \pm 1)} |S, m_s \pm 1\rangle$

$$\Rightarrow S_+ |-\frac{1}{2}\rangle = \hbar |\frac{1}{2}\rangle, \quad S_- |\frac{1}{2}\rangle = \hbar |-\frac{1}{2}\rangle$$

$$S_+ |\frac{1}{2}\rangle = 0$$

$$S_- |-\frac{1}{2}\rangle = 0$$

Propenho $S_+ = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow b = \hbar \text{ e } d = 0$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow a = 0 \text{ e } c = 0$$

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

$$S_+ = \hbar |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$$

$$S_- = \hbar |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$$

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

$$\Rightarrow S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

Matrizes de Pauli

$$\underline{\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}}$$

Estado geral de spin

Os possíveis valores após uma medição são $|\pm 1/2\rangle$,
logo, o estado antes da medição é

$$|\chi\rangle = a|1/2\rangle + b|-1/2\rangle \text{ ou } a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

normalizando:

$$1 = (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 + |b|^2$$

$$1 = \langle \chi | \chi \rangle \leftarrow \text{notado por bracket}$$

"analogia de Dirac": $|\chi\rangle \mapsto \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

$$\langle \chi | \mapsto (a^* \ b^*)$$

Valor médio de S_z :

$$\langle S_z \rangle_{|\chi\rangle} = \langle \chi | S_z | \chi \rangle = (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 - |b|^2$$

↑
número

O que é a grandeza $|\chi_1\rangle\langle\chi_2|$?

$$|\chi_1\rangle\langle\chi_2| = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} (a_2^* \ b_2^*) = \begin{pmatrix} a_1 a_2^* & a_1 b_2^* \\ b_1 a_2^* & b_1 b_2^* \end{pmatrix},$$

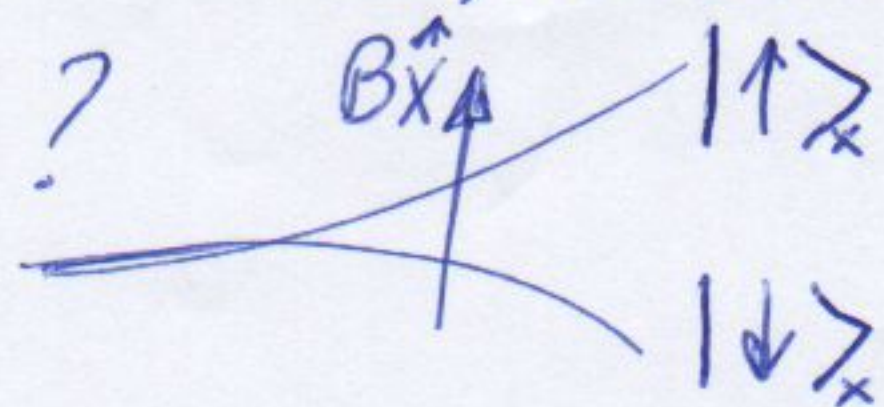
que é um operador!

Verifique a op de: $|1/2\rangle\langle 1/2|$, $|1/2\rangle\langle -1/2|$, $|-1/2\rangle\langle 1/2|$, $|-1/2\rangle\langle -1/2|$.

Elem. de matriz de S_x :

$$\begin{aligned} \langle \uparrow | S_x | \downarrow \rangle &= \langle \uparrow | \frac{S_+ + S_-}{2} | \downarrow \rangle = \frac{1}{2} \langle \uparrow | S_+ | \downarrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \uparrow | S_- | \downarrow \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Se ao invés de medir a componente $\hat{z}$, medirmos a componente $\hat{x}$?



• obviamente obtemos $\pm \mu_B$ na direc $\hat{x}$

• diagonalizando S_x : $S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \hbar/2, \text{ óbvio!}$$

$$\text{Spinors: } \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{cases} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow a = b = 1/\sqrt{2} \\ \text{ou} \\ -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow a = -b = 1/\sqrt{2} \end{cases}$$

Então, // o valor $\hbar/2$ temos

$$|1/2\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{|1/2\rangle + |-1/2\rangle}{\sqrt{2}}$$

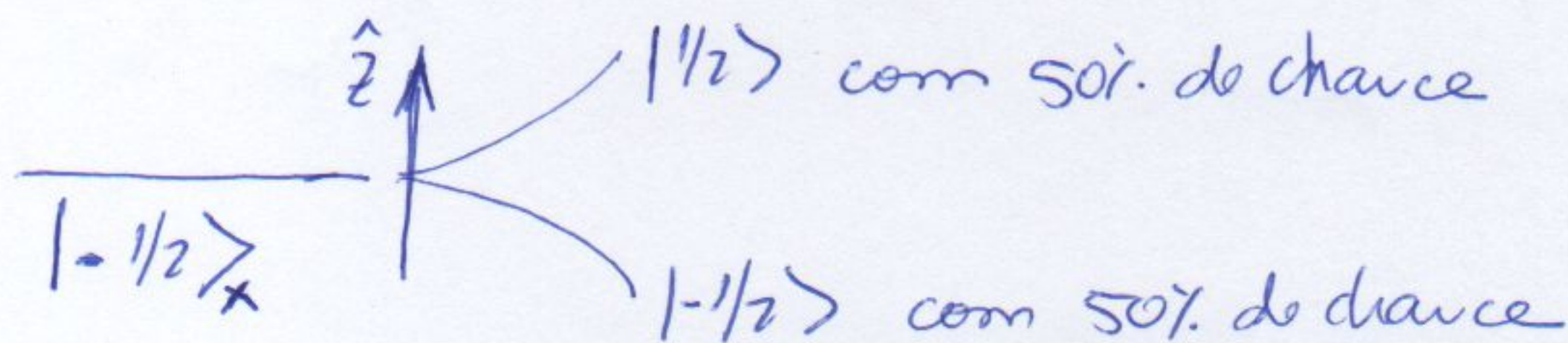
e // $-\hbar/2$,

$$|-1/2\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{|1/2\rangle - |-1/2\rangle}{\sqrt{2}}$$

Se em quântica mesmo p/ termos algo em $\hat{x}$ como combinação linear de coisas em $\hat{z}$!

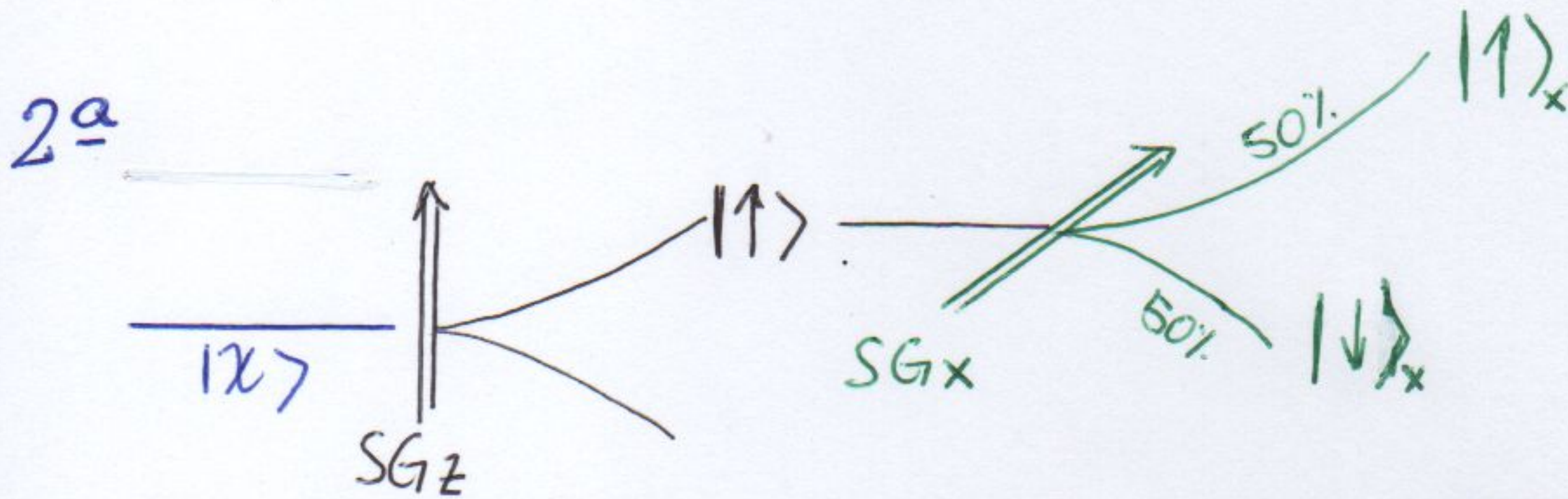
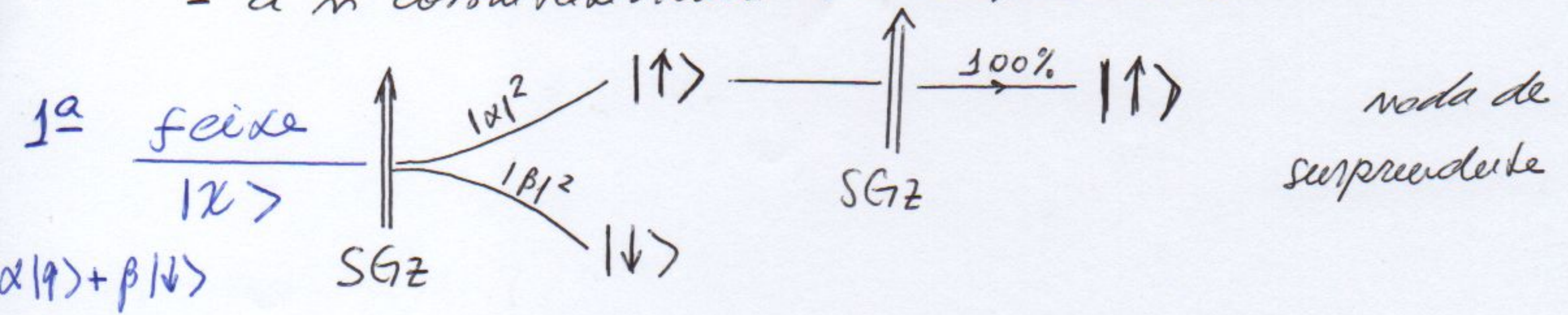
Então, medindo o componente $\hat{z}$ de $|1/2\rangle_x$ teremos probab.

$$|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = 1/2 \text{ de obter } |1/2\rangle \text{ e } |-\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = 1/2 \text{ de obter } |-1/2\rangle$$



Medidas Sucessivas

- a não comutatividade das componentes de $\vec{S}$ -



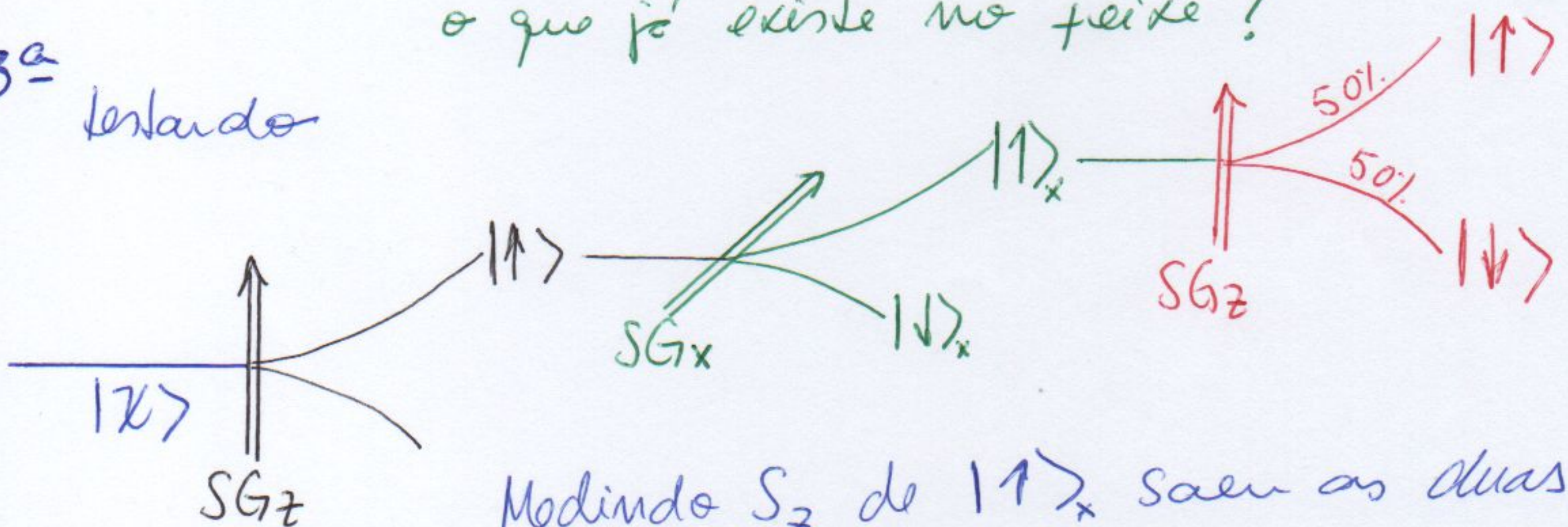
• saem $|\uparrow\rangle_x$ e $|\downarrow\rangle_x$ com igual probabilidade

• Será que no caso se que emergem $|\uparrow\rangle_x$ podemos dizer que no feixe de entrada em SGx tinhamos 50% de $(|\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle_x)$ (e os outros 50% de $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle_x)$)?

Não!

ou seja, será que o SG opera filtra o que já existe no feixe?

3ª
testando



Medindo S_z de $|\uparrow\rangle_x$ saem as duas possibilidades, $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, com igual chance!

Então, devemos descartar que em $|\uparrow\rangle_x$ tinhamos 50% de $(|\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle_x)$ e 50% de $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle_x)$.

Ou seja, $\bar{n}$ podemos afirmar que 50% dos átomos
do feixe radionuclídeos S_z e S_x simultaneamente!
117

A medida em SG_x destrói toda informação
a respeito da componente S_z ; ~~no~~ mesmo antes
de SG_x tendo garantido que $\bar{n}$ havia $|\downarrow\rangle$,
a medida SG_x dá de volta a chance de
nova medida de S_z aparecer $|\downarrow\rangle$! Isso
é a essência do princípio de incerteza,
agora existente devido à não comutatividade
das componentes de spin.