

## Notas de Aula de Física Quântica (BCK0103)

Prof. Dr. Marcelo Augusto Leigui de Oliveira

**O spin do elétron**

## I. MOMENTO MAGNÉTICO

Vimos que para uma partícula movendo-se numa trajetória circular a velocidade constante o momento angular é  $L = mvr$ . Ademais:

$$v = \frac{2\pi r}{T} = 2\pi r f \Rightarrow f = \frac{v}{2\pi r} \text{ ou } T = \frac{2\pi r}{v}$$

Por outro lado, o momento magnético de uma espira circular de corrente  $i$  é:

$$\mu = i \cdot A = \frac{q}{T} \pi r^2 = q \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{q}{2} (vr) = \frac{q}{2} \left( \frac{L}{m} \right) \Rightarrow$$

$$\boxed{\vec{\mu} = \frac{q}{2m} \vec{L}}$$

e esta relação pode ser estendida para um sistema de partículas desde que a razão  $(q/m)$  seja a mesma para todas as partículas do sistema.

Aplicando-a para um elétron orbitando o átomo de hidrogênio:

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} \equiv \mu_B \sqrt{l(l+1)},$$

onde  $\mu_B$  é o *magneton de Bohr*, que vale:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 5,79 \cdot 10^{-9} \text{ eV/T}.$$

Em casos mais complexos, temos<sup>1</sup>:

$$\vec{\mu} = g_L \left( -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \right),$$

onde  $g_L$  é a *razão giromagnética*, ou o *fator-g de Landé*, que para o elétron:  $g_L = 1$ .

Para a componente  $z^2$ :

$$\mu_z = \frac{-e}{2m_e} m_l \hbar = -m_l \mu_B.$$

Assim, temos equações análogas às do momento angular, ou seja, o momento magnético é **quantizado**:

$$\begin{cases} \mu = \sqrt{l(l+1)} (g_L \mu_B) \\ \mu_z = -m_l (g_L \mu_B). \end{cases}$$

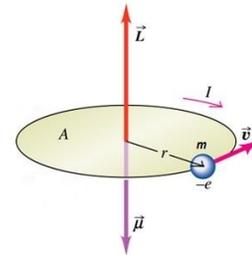


Figura 1: Momento angular orbital e momento magnético de um elétron em movimento circular.

<sup>1</sup>Note que fizemos  $q = -e$ .

<sup>2</sup>A componente  $z$  do momento magnético,  $\mu_z$ , deve levar em conta o sinal da carga, o módulo,  $\mu$ , não precisa.

Seja um ímã num campo magnético externo, ele sofrerá um torque:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B},$$

que tende a alinhar  $\vec{\mu}$  com  $\vec{B}$ .

O trabalho infinitesimal de uma força externa para trazer o ímã desde o alinhamento até um ângulo  $d\theta$  é:

$$dW = \tau d\theta = \mu B \sin\theta d\theta = \mu B d(-\cos\theta) = d(-\mu B \cos\theta) = d(-\vec{\mu} \cdot \vec{B}),$$

de maneira que podemos definir a energia potencial:

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

e se  $\vec{B} = B\hat{z} \Rightarrow U = -\mu_z B$ .

Agora, suponha que o campo magnético externo seja não-uniforme, o ímã (momento magnético) sofrerá a atuação de uma força:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U = -\vec{\nabla}(-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \Rightarrow F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

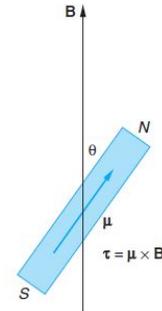


Figura 2: Ímã (dipolo magnético) em um campo magnético externo.

## II. O EXPERIMENTO DE STERN E GERLACH

(1922) Stern<sup>3</sup> e Gerlach<sup>4</sup> realizaram um experimento para detectar o momento angular orbital de átomos de prata, mas observaram algo inesperado:



Figura 3: (a) Stern e Gerlach; (b) o experimento em que foi observado a quantização do spin do elétron.

<sup>3</sup>Otto Stern (1888-1969), físico alemão; Nobel de física (1943).

<sup>4</sup>Walther Gerlach (1889-1979), físico alemão.

### III. MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO

(1925) Pauli<sup>5</sup> sugeriu que, além dos números quânticos  $n$ ,  $l$  e  $m$ , os elétrons possuem um quarto número quântico, o *spin* ( $s$ ), com valor **semi-inteiro**  $s = 1/2$ :

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \text{ para } s = 1/2.$$

(1925) Goudsmit<sup>6</sup> e Uhlenbeck<sup>7</sup> propuseram que o valor do spin ( $m_s$ ) era a componente  $z$  de um **momento angular intrínseco**:

$$S_z = m_s \hbar, \text{ para } m_s = -1/2, +1/2,$$

onde esta componente  $z$  é também quantizada ( $|m_s| \leq s$ ) e existem  $(2s + 1) = 2$  estados possíveis.

Aplicando-se os resultados anteriores do momento magnético para o spin ( $s = 1/2$ ):

$$\mu = \mu_B \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3/4} \mu_B,$$

$$\mu_z = m_s \mu_B = \pm \frac{1}{2} \mu_B,$$

e, do potencial:

$$U = -\mu_z B = \mp \frac{1}{2} \mu_B B,$$

indicando duas interações possíveis dos elétrons com o campo  $\vec{B}$  a depender da orientação do spin do elétron:

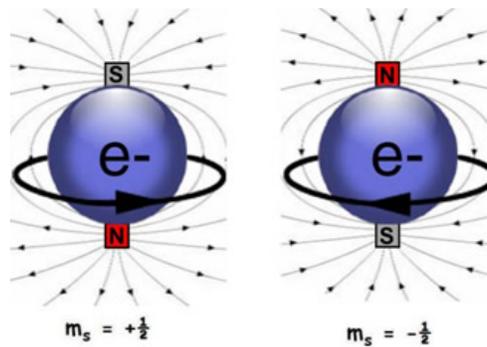


Figura 5: O spin do elétron.



Figura 4: Wolfgang Pauli.

<sup>5</sup>Wolfgang Pauli (1900-1958), físico austríaco; Nobel de física (1945).

<sup>6</sup>Samuel Abraham Goudsmit (1902-1978), físico holandês.

<sup>7</sup>George Eugene Uhlenbeck (1900-1988), físico javanês (Batávia).

Verifica-se, no entanto, que o momento magnético intrínseco é:

$$\mu_z = -m_s(g_s\mu_B),$$

com  $g_s = 2,002319$  (resultado compatível com a eletrodinâmica quântica).

Então:

$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz} = -m_s g_s \mu_B \frac{dB}{dz} = \mp \frac{1}{2} g_s \mu_B \frac{dB}{dz}.$$

(1927) T. E. Phipps e J. B. Taylor confirmaram os resultados para o momento angular intrínseco (spin) do elétron no átomo de hidrogênio.

#### IV. AS FUNÇÕES DE ONDA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Como há um número quântico extra, as funções de onda completas são:

$$\psi_{nlm_l m_s} = R_{nl} Y_{lm_l} X_{m_s}$$

com

- $n$ : número quântico principal (quantização da energia):  $n = 1, 2, 3, \dots$ ;
- $l$ : número quântico orbital (quantização do momento angular orbital):  $l = 0 = 1, 2, \dots, n - 1$ ;
- $m_l$ : número quântico magnético (quantização da projeção z do momento angular orbital):  $m_l = -l, -l + 1, \dots, l$ ;
- $m_s$ : spin (projeção z do momento angular intrínseco):  $m_s = -1/2, +1/2$ .

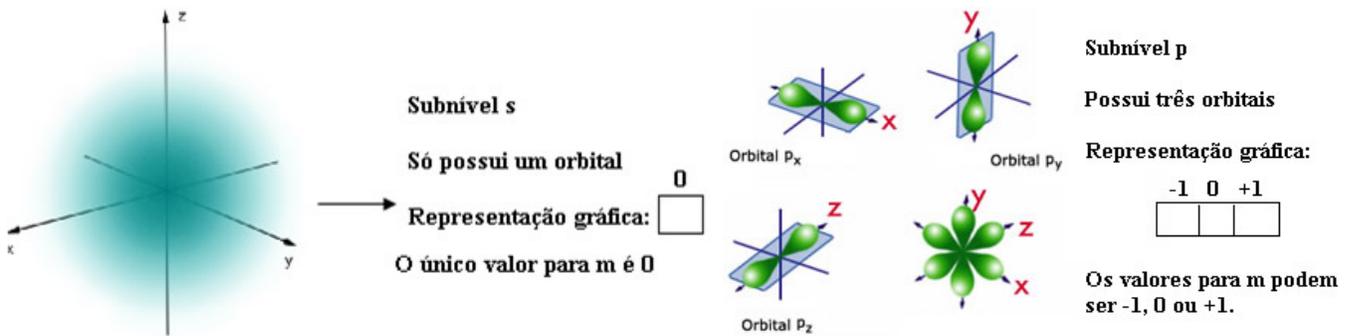


Figura 6: Orbitais s e p do átomo de hidrogênio.

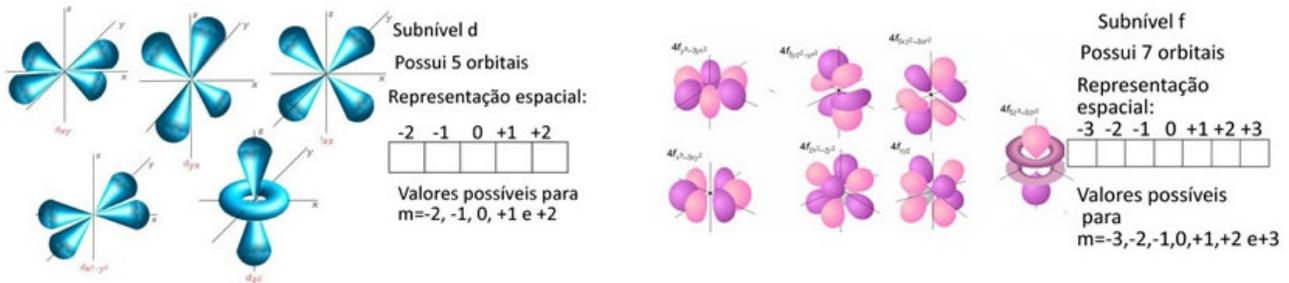


Figura 7: Orbitais d e f do átomo de hidrogênio.

### V. O PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO DE PAULI

Sejam dois elétrons presos a um poço de potencial infinito unidimensional (de largura  $L$ ), a equação de Schrödinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} \right] + V(x_1, x_2) \psi(x_1, x_2) = E \psi(x_1, x_2).$$

Se os elétrons não interagirem entre si, podemos escrever o potencial na forma  $V(x_1, x_2) = V(x_1) + V(x_2)$  e separar as variáveis  $x_1$  e  $x_2$ , tal que a solução assume a forma:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_n(x_1) \psi_m(x_2) = C \text{sen} \left( \frac{n\pi x_1}{L} \right) \text{sen} \left( \frac{m\pi x_2}{L} \right) \quad (1)$$

e a densidade de probabilidade de encontrar o elétron 1 em  $dx_1$  e o elétron 2 em  $dx_2$  é

$$\rho = |\psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2.$$

Mas os elétrons são **idênticos** (não temos como saber qual é qual), assim, se permutarmos os índices, as probabilidades devem ser as mesmas:

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2 \Rightarrow \begin{cases} \psi(x_1, x_2) = +\psi(x_2, x_1) & \text{(função de onda simétrica)} \\ \psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1) & \text{(função de onda antissimétrica)} \end{cases}$$

Porém, este resultado é incompatível com a solução da equação 1 (ao permutarmos os índices, obtemos uma função de onda diferente e poderíamos distinguir os elétrons 1 e 2).

No entanto, podemos construir duas combinações lineares da solução geral (uma simétrica e uma antissimétrica) que respeitam a indistinguibilidade:

$$\begin{aligned} \psi_S &= C[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)] && \text{(simétrica)} \\ \psi_A &= C[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)] && \text{(antissimétrica)} \end{aligned}$$

Por fim, verificamos que se  $n = m$  a função de onda antissimétrica anula-se (indicando que as partículas não podem ocupar os mesmos estados quânticos no caso antissimétrico).

Experimentalmente, observa-se que a função de onda total de um sistema formado por mais de um elétron é sempre antissimétrica.

Formula-se assim:

- O *princípio de exclusão de Pauli*: dois elétrons de um mesmo átomo não podem ocupar o mesmo estado quântico, isto é, não podem ter os mesmos quatro números quânticos;
- A *regra de Hund*: o preenchimento dos orbitais de um mesmo subnível é feito, inicialmente, de modo a ter o maior número possível de elétrons isolados (desemparelhados).

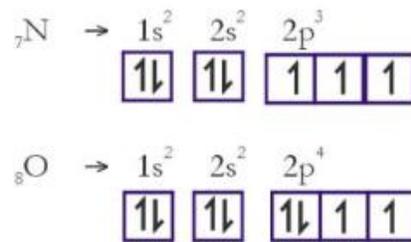


Figura 8: Distribuição eletrônica de acordo com o princípio de exclusão de Pauli e a regra de Hund.

O princípio de exclusão de Pauli vale para todas as partículas de spin semi-ínteiro ( $s = 1/2, \dots$ ), também chamadas de *férmions*, tais como os prótons, os nêutrons, os elétrons, os múons, etc. As partículas de spin inteiro ( $s = 0, 1, \dots$ ), denominadas *bósons*, tais como os fótons ou os bósons de Higgs, não seguem o princípio de exclusão de Pauli.