

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 μ_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, temos¹:

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

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**:

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

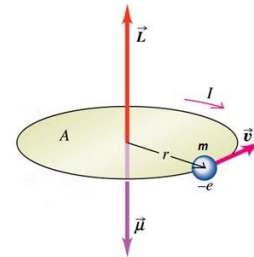


Figura 1: Momento angular orbital e momento magnético de um elétron em movimento circular.

¹Note que fizemos $q = -e$.

²A componente z do momento magnético, μ_z , deve levar em conta o sinal da carga, o módulo, μ , 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:

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

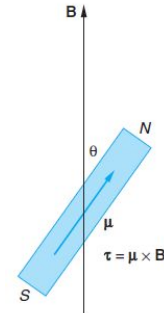


Figura 2: Ímã (dipolo magnético) em um campo magnético externo.

II. O EXPERIMENTO DE STERN E GERLACH

(1922) Stern³ e Gerlach⁴ 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.

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

⁴Walther Gerlach (1889-1979), físico alemão.

III. MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO

(1925) Pauli⁵ 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) Goudsmit⁶ e Uhlenbeck⁷ 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:

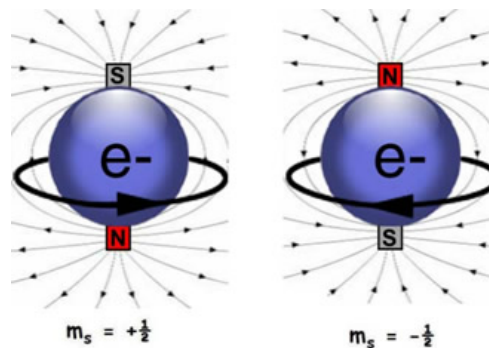


Figura 5: O spin do elétron.



Figura 4: Wolfgang Pauli.

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

⁶Samuel Abraham Goudsmit (1902-1978), físico holandês.

⁷George 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): $m_s = -1/2, +1/2$.

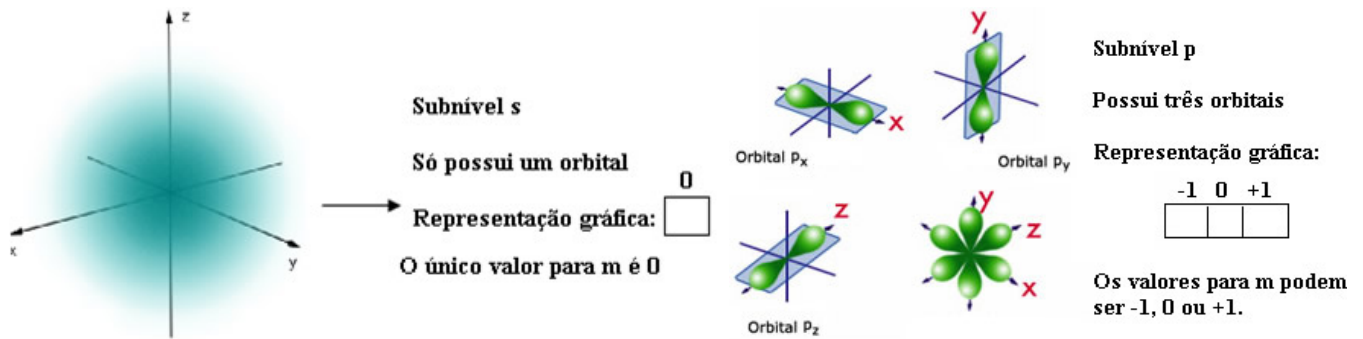


Figura 6: Orbitais s e p do átomo de hidrogênio.

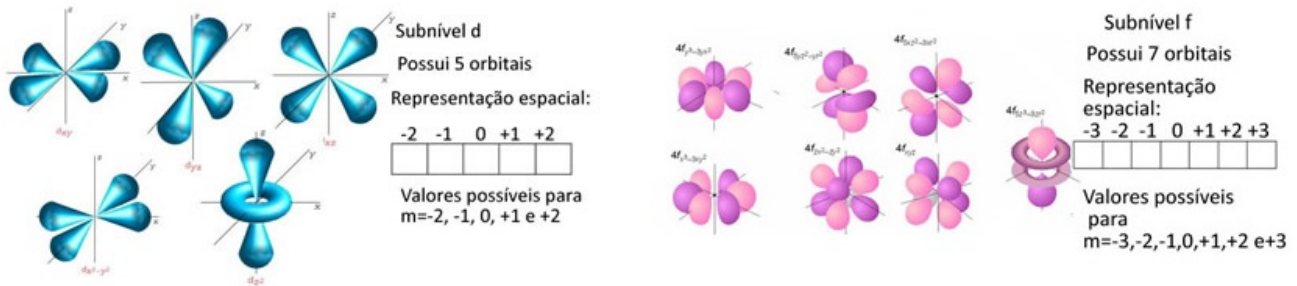


Figura 7: Orbitais d e f do átomo de hidrogênio.

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:

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

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).

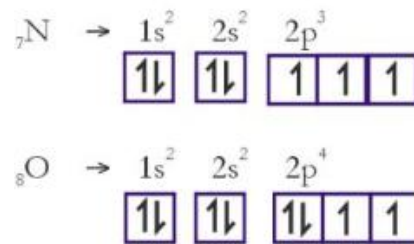


Figura 8: Distribuição eletrônica de acordo com o princípio de exclusão de Pauli e a regra de Hund.

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.