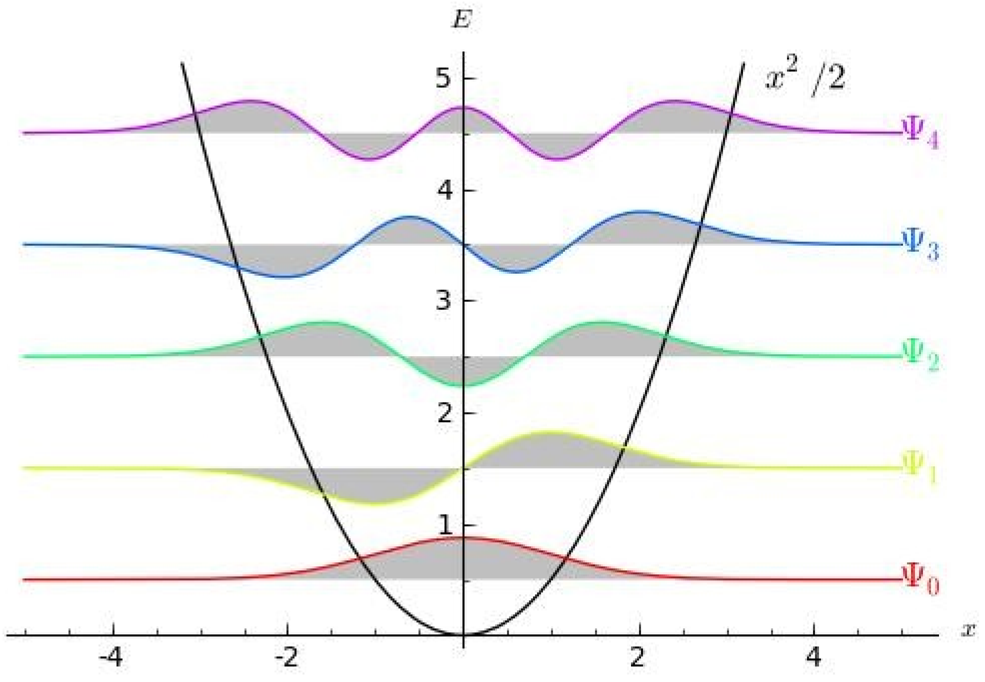
Mecânica Quântica

Aula 14: Spin do Elétron, Princípio de Exclusão de Pauli

Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br

Universidade Federal do ABC



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html

O Spin do Elétron

O Experimento de Stern-Gerlach Revisitado

O mesmo experimento pode ser feito com um feixe de elétrons. (É preciso aplicar um campo elétrico horizontal para cancelar a força magnética que os elétrons sofrem por serem partículas carregadas, ao contrário de átomos de prata.)

Neste caso, os elétrons não estão em órbita(l) em torno de um núcleo atômico e não têm momento angular orbital.

Mesmo assim, o feixe se divide em dois!

Isto, por que os elétrons têm um tipo de momento angular instrínseco (ao contrário do momento angular orbital), chamado spin, cuja componente *z* pode assumir dois valores.

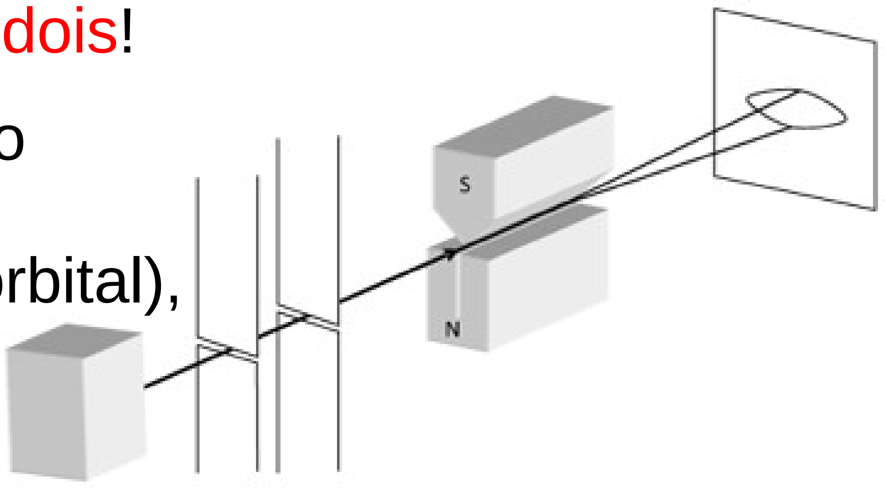


Figura 1 - Representação esquemática do experimento de Stern-Gerlach.

O Spin do Elétron

Formalmente, o spin pode ser tratado como o momento angular orbital, mas com o número quântico do módulo $s = ½$ em lugar de um número inteiro:

$s = ½ \Rightarrow S = |\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar = \sqrt{3}/2 \cdot \hbar$,
$m_s = \pm ½ \Rightarrow S_z = m_s \cdot \hbar = \pm ½ \cdot \hbar$

Os estados $m_s = +½$ e $m_s = -½$ são frequentemente chamados "spin pra cima", ↑, e "spin pra baixo", ↓.

O Spin do Elétron

O momento magnético do elétron devido ao spin é

$\boldsymbol{\mu}_s = -(g_s \mu B/\hbar)\cdot\mathbf{S}$, onde $g_s = 2$ = fator g de spin

e seu componente z: $\mu_{s,z} = -m_s \cdot g_s \mu_B = \mp \mu_B$

Energia associada ao alinhamento do spin com um campo externo **B**:

$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = \mu_{s,z} B = -m_s \cdot g_s \mu_B B = \mp \mu_B B$

Força aplicada por um campo não-homogêneo:

$F_z = \partial B_z/\partial z \cdot \mu_{s,z} = \mp \partial B_z/\partial z \cdot \mu_B$

Spin

Outras partículas elementares também têm spin. Exemplos:
- outros leptons e quarks: $s = ½$
- fótons, glúons, ...: $s = 1$

e partículas compostas também:
- prótons e nêutrons (3 quarks): $s = ½$
- núcleos: depende do alinhamento dos spins dos núcleons
- átomos: depende do alinhamento dos spins e momentos orbitais das componentes

Partículas com spins inteiros são chamados bósons,
e com spins semi-inteiros, férmions.

O Spin do Elétron

Voltando a elétrons em átomos:

Então, para um elétron num átomo, agora temos além de n, l e m_l um quarto número quântico, ms, o componente z do spin que pode assumir os valores +½ ou -½:

=> Função de onda agora realmente completa de um elétron em um átomo:

$\psi_{nlm_lm_s}$ 4 números quânticos

Exemplo: existem dois estados fundamentais:

$\psi_{100-½}$ e $\psi_{100+½}$.

A Função de Onda para Duas (ou mais) Partículas

Para um sistema de duas partículas, a função de onda vai ser uma função das posições das duas partículas:

$\psi(x_1, x_2)$, tal que $\psi(x_1, x_2)\psi^*(x_1, x_2)dx_1dx_2 = P(x_1, x_2)dx_1dx_2$

é a probabilidade de encontrar, ao mesmo tempo, a partícula 1 entre as posições x_1 e x_1+dx_1, e a partícula 2, entre x_2 e x_2+dx_2.

A condição de normalização vira:

$$\int_{x_2=-\infty}^{x_2=+\infty}\int_{x_1=-\infty}^{x_1=+\infty} P(x_1, x_2)\, dx_1dx_2 = 1$$

Analogicamente, no caso 3D temos
$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$ e
$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)dx_1dy_1dz_1dx_2dy_2dz_2 = P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)dx_1dy_1dz_1dx_2dy_2dz_2$,
e a condição de normalização é uma integral sextupla.

A Equação de Schrödinger para Duas Partículas

A Equação de Schrödinger vira:

$$\underbrace{-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x_1,x_2)/\partial x_1^2}_{E_{cin,1}\psi} \underbrace{-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x_1,x_2)/\partial x_2^2}_{E_{cin,2}\psi} + V(x_1,x_2)\cdot\psi(x_1,x_2) = E\cdot\psi(x_1,x_2),$$

onde $V(x_1, x_2) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_{1<->2}(x_1, x_2)$,
$V_1(x_1)$ = o potencial externo que a partícula 1 "sente",
$V_2(x_2)$ = o potencial externo que a partícula 2 "sente", e
$V_{1<->2}(x_1, x_2)$ = a energia potencial da interação entre as 2 partículas.

No caso, que as partículas não interagem,
$V(x_1, x_2) = V_1(x_1) + V_2(x_2)$.

Partículas Intercambiáveis

Um caso interessante é, se as duas partículas são iguais (por exemplo dois elétrons).
Ao contrário do caso clássico, no caso quântico duas partículas “iguais” são idênticas mesmo, indistinguíveis de uma maneira fundamental.
Isto implica na intercambiabilidade delas, o fato de que “nada muda”, se elas trocam de papel.

A função de onda tem que refletir isto:

$|\psi(x_2, x_1)|^2 = |\psi(x_1, x_2)|^2$
=> $\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2)$ função simétrica*,
ou $\psi(x_2, x_1) = -\psi(x_1, x_2)$ função antissimétrica*

*Se trata da simetria em relação à operação “trocar as partículas”, não alguma simetria geométrica.

Partículas Intercambiáveis

Sejam $V_{1<->2}(x_1, x_2) = 0$ (sem interação entre as partículas)
e $V_1(x) = V_2(x) = V(x)$ (as duas partículas são submetidas ao mesmo potencial externo),
e sejam $\psi_n(x)$ e $\psi_m(x)$ duas soluções do problema de uma partícula neste potencial $V(x)$,
então as combinações que seriam soluções clássicas
"partícula 1 no estado n e partícula 2 no estado m"
e "partícula 1 no estado m e partícula 2 no estado n",
$\psi_{nm}(x_1, x_2) = \psi_n(x_1)\cdot\psi_m(x_2)$ e $\psi_{mn}(x_1, x_2) = \psi_m(x_1)\cdot\psi_n(x_2)$
não satisfazem a intercambiabilidade:

$$|\psi_{nm}(x_2, x_1)|^2 = |\psi_n(x_2)\cdot\psi_m(x_1)|^2 = |\psi_n(x_2)|^2\cdot|\psi_m(x_1)|^2 = |\psi_m(x_1)|^2\cdot|\psi_n(x_2)|^2$$
$$\neq |\psi_{nm}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_n(x_1)|^2\cdot|\psi_m(x_2)|^2 \text{ e}$$
$$|\psi_{mn}(x_2, x_1)|^2 = |\psi_m(x_2)\cdot\psi_n(x_1)|^2 = |\psi_m(x_2)|^2\cdot|\psi_n(x_1)|^2 = |\psi_n(x_1)|^2\cdot|\psi_m(x_2)|^2$$
$$\neq |\psi_{mn}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_m(x_1)|^2\cdot|\psi_n(x_2)|^2,$$

isto é, elas são nem simétricas, nem antissimétricas.

Partículas Intercambiáveis

Mas as seguintes combinações satisfazem a intercambiabilidade e são soluções no caso quântico:

$\psi_S(x_1, x_2) = C_S \cdot [\psi_n(x_1) \cdot \psi_m(x_2) + \psi_m(x_1) \cdot \psi_n(x_2)]$ solução simétrica

$\psi_A(x_1, x_2) = C_A \cdot [\psi_n(x_1) \cdot \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \cdot \psi_n(x_2)]$

solução antissimétrica

onde C_S e C_A são constantes de normalização.

Estas soluções podem ser interpretadas como
“Metade do tempo (ou metade das vezes que a gente mede),
a partícula 1 está no estado *n* e partícula 2, no estado *m*,
e na outra metade, a partícula 1 está no estado *m* e partícula 2, no estado *n*”.

Partículas Intercambiáveis

Férmions (partículas com spins semi-inteiros) idênticos sempre fazem combinações antissimétricas
e bósons (spins inteiros), simétricas.

O que isto significaria para dois férmions idênticos no mesmo estado, $n = m$?

$$\psi_A(x_1, x_2) = C_A \cdot [\psi_n(x_1) \cdot \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \cdot \psi_n(x_2)]$$
$$= C_A \cdot [\psi_n(x_1) \cdot \psi_n(x_2) - \psi_n(x_1) \cdot \psi_n(x_2)] = 0$$

não pode ser!

=> Princípio de Exclusão de Pauli

O Princípio de Exclusão de Pauli

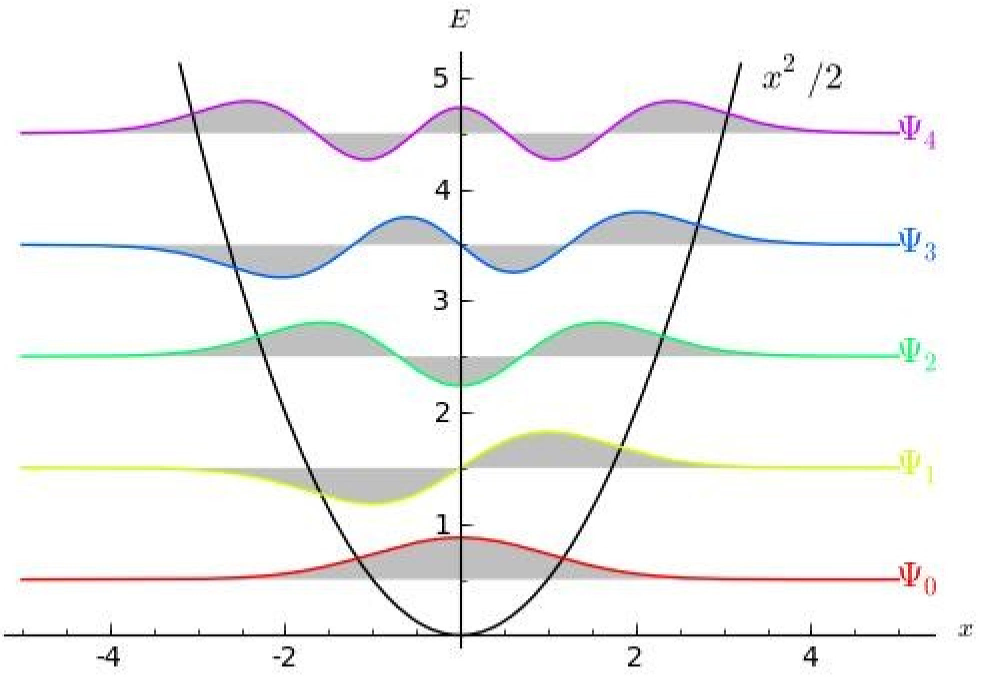
1925 (elétrons), 1940 (todos os férmions)

Dois (ou mais) férmions idênticos (exemplos: elétrons, prótons, nêutrons) não podem encontrar-se ao mesmo tempo no mesmo estado quântico, dado pela função de onda, respectivamente, pelos números quanticos.
Para elétrons num átomo isto significa, só dois e^{-} podem estar no mesmo orbital, um com spin ↑ e um com spin ↓.

Bósons (ex. fótons, partículas α, átomos de hélio), não são sujeitos ao princípio de exclusão.
Pelo contrário, bósons indênticos têm uma certa preferência por encontrar-se no mesmo estado, i. e. os fótons num raio de laser.

Física Quântica

FIM PARA HOJE



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html