Spin

O momento angular $\vec{L}$ é o gerador das rotações:

Eg uma rotação ao redor de $\hat{z}$ por um ângulo ϕ:

$$R(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} L_z \phi}$$

onde $R(\phi)$ é o operador de rotação, L_z é o operador momento angular ao longo do $\hat{z}$ e ϕ é o parâmetro contínuo.

Em geral tínhamos visto que uma rotação ao redor de um eixo arbitrário $\hat{m}$ é dada por

$$R(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \hat{m} \phi}$$

Mas $R(\phi)$ é aplicado à $|\psi\rangle$ e resultava na função de onda

$$\langle \vec{r} | R(\phi) | \psi \rangle = \psi_\phi(\vec{r})$$

$\downarrow$

função de onda "rotada"

Mas nos exemplos que tínhamos visto até agora $|\psi\rangle = |\psi(\vec{r})\rangle \rightarrow \psi(\vec{r})$

e portanto a ação de $R(\phi)$ no estado (2)
$|\psi\rangle$ era simplesmente a mudança do argumento, i.e.

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{R(\phi)} \psi(\vec{r}\,')$$

$$\vec{r}\,' = \mathbb{R}_\phi \vec{r}$$ onde $\mathbb{R}_\phi$ é a matriz de rotação pelo ângulo ϕ.

$\Rightarrow$ {Função de onda é um escalar (função de onda escalar)}

Mas em geral podemos ter funções de onda que não são escalares.

Por exemplo, a função de onda poderia ser um vetor, i.e.:

$$\vec{\psi}(x,y,z) = \psi_x(x,y,z)\,\hat{x} + \psi_y(x,y,z)\,\hat{y} + \psi_z(x,y,z)\,\hat{z}$$

Neste caso, podemos escrever a função de onda como

$$|\psi\rangle \to \vec{\psi}(\vec{r}) \to \begin{pmatrix} \psi_1(x,y,z) \\ \psi_2(x,y,z) \\ \psi_3(x,y,z) \end{pmatrix}$$

Então uma rotação fará **DUAS** coisas

1) Rotar o argumento $\vec{r} \to \vec{r}\,'$

$$\vec{r}\,' = \mathbb{R}(\vec{\theta})\,\vec{r} \quad , \quad \mathbb{R}(\vec{\theta}) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$ rotação! clássica

e em 3D $\vec{\theta} \to (\theta, \phi)$

2) Mas o operador unitário R atuando no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ ($|\psi\rangle$) não só faz isso também atua misturando as componentes do vetor $\vec{\Psi}(\vec{r})$.

$$\Rightarrow \quad \vec{\Psi}(\vec{r}) \longrightarrow R\,\vec{\Psi}(\vec{r}) = \vec{\Psi}\,'(\vec{r}\,')$$

onde agora

$$\vec{\Psi}\,' = \Psi_x'(\vec{r}\,') + \Psi_y'(\vec{r}\,') + \Psi_z'(\vec{r}\,')$$

e, por exemplo,

$$\Psi_x'(\vec{r}) = a\,\Psi_x(\vec{r}) + b\,\Psi_y(\vec{r}\,') + c\,\Psi_z(\vec{r}\,')$$

com a, b, c coeficientes complexos.

MAS tínhamos visto que $\vec{L}$ gera as rotações correspondentes a $\vec{r} \to \vec{r}\,'$.

{Quem gera as rotações correspondentes à mistura das componentes $\psi \to \psi'$?}

Precisamos de um novo gerador, $\vec{S}$.

$\vec{S}$ é o gerador das rotações generalizadas que tem o efeito de misturar os componentes de $\vec{\psi}$ como vetor.

$$\Rightarrow \vec{\psi}\,' = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}' = R \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

onde o operador R infinitesimal é agora

$$R_z(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} L_z - \frac{i\varepsilon}{\hbar} S_z$$

Para um estado escalar (só uma componente) $S_z = 0$ e a gente recupera o resultado anterior

MAS em geral temos

$$R_z(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon J_z$$

onde $\boxed{J_z \equiv L_z + S_z}$

e J_z é o gerador total dos rotações ao redor de $\hat{z}$, chamado de momento angular total. Em coordenadas $\vec{r}$,

$L_z = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial \phi}$ atua nas coordenadas $(x,y,z)=\vec{r}$ (ou $(r,\theta,\phi)=\vec{r}$)

Em geral, se temos uma função de onda de n componentes ($n=3$ para o vetor $\vec{\psi}$)

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon \underbrace{\begin{pmatrix} -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \end{pmatrix}}_{n\times n \text{ diagonal}} - \frac{i}{\hbar} S_z \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

S_z em geral não é diagonal ($n\times n$)

Para rotações ao redor qualquer eixo $\hat{n}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{J}$: momento angular total ; $\vec{S}$: spin

$\vec{L}$: " " orbital

Por outra parte, sabemos que

$$[L_i, L_j] = i \varepsilon_{ijk} L_k$$

Impondo

$$\boxed{[S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k}$$

$$\Rightarrow \quad \left\{ [J_i, J_j] = i \varepsilon_{ijk} J_k \right\}$$

Esta última igualdade é equivalente a impor que a operação de rotação generalizada (ou total) se comporte tal como as rotações clássicas. (Verificar em lista).

Mas o Spin $\vec{S}$ é uma propriedade muito diferente do momento angular orbital $\vec{L}$.

Por exemplo, um elétron com momento $\vec{p} = 0$, deve ter $\vec{L} = 0$. Mas medições resultam em $\pm \frac{\hbar}{2}$ quando medido ao longo de um dado eixo (eg $\hat{z}$).

$\Rightarrow S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ para o elétron, mesmo se $\vec{p} = 0$.

$\Rightarrow \vec{S}$ é uma propriedade intrínseca do elétron.

Essa evidência experimental indica que a função de onda do elétron é um objeto de duas componentes : $m = 2$.

Em geral, as regras de comutação

$$[S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k$$

resultam em

$$\text{e} \left\{ \begin{array}{l} S_z |s,m\rangle = \hbar m |s,m\rangle \\ S^2 |s,m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s,m\rangle \end{array} \right\}$$

onde $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

e $m = -s, \ldots\ldots s$

No caso do momento angular orbital $\vec{L}$ se bem a princípio vimos que l poderia ser semi-inteiro, isto não é de fato possível.

A razão é a forma da dependência de m na função de onda.

$$\Psi(\vec{r}) \sim e^{im\phi}$$

$$\Rightarrow \Psi(r,\theta,\phi+2\pi) \longrightarrow e^{im\phi} \times e^{im2\pi}$$

$\Rightarrow$ se m fosse semi-inteiro obteríamos

$$\Psi(r,\theta,\phi+2\pi) = (-1)\,\Psi(r,\theta,\phi)$$

mas isto é inconsistente!

$\Rightarrow$ para m ser só inteiro $\Rightarrow$ $\boxed{\ell \text{ deve ser inteiro}}$

Mas s não tem essa limitação.

$\Rightarrow$ $s = 1/2$ é permitido.

Em particular, $s = 1/2$ é o valor intrínseco do spin do elétron (e próton, neutron, ...)

$\Rightarrow$ A matriz que representa o operador $\vec{S}$ (matrizes) é de 2×2.

A função de onda agora é

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+(x,y,z) \\ \Psi_-(x,y,z) \end{pmatrix} \qquad \underline{\text{espinor}}$$

Em geral podemos escrever

$$\Psi = \Psi_+(x,y,z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \Psi_-(x,y,z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Agora queremos obter a representação matricial de $\vec{S}$.

$s = 1/2 \Rightarrow S^2|s,m\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2}(1+1/2)|s,m\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|s,m\rangle$

$\Rightarrow$ se $S^2 = \begin{pmatrix}a & b\\c & d\end{pmatrix}$ onde a,b,c,d são números $\mathbb{C}$

Se aplicamos S^2 a $\Psi_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ temos

$$\begin{pmatrix}a & b\\c & d\end{pmatrix}\Psi_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \Psi_+\begin{pmatrix}a\\c\end{pmatrix} = \Psi_+\frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$\Rightarrow c = 0, \quad a = \frac{3}{4}\hbar^2$

Similarmente,

$$\begin{pmatrix}a & b\\0 & d\end{pmatrix}\Psi_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \Psi_-\begin{pmatrix}b\\d\end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\Psi_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$\Rightarrow b = 0, \quad d = \frac{3}{4}\hbar^2$

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

Para obter a forma matricial de S_z usamos que

$$S_z \left|\tfrac{1}{2}, m\right\rangle = \hbar m \left|1/2, m\right\rangle \qquad \text{para } m = \pm\tfrac{1}{2}$$

$$-\tfrac{1}{2} \leq m \leq \tfrac{1}{2}$$

$$\Rightarrow S_z \,\Psi_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \Psi_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} \Rightarrow \Psi_+ \begin{pmatrix} e \\ g \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \Psi_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{e = \frac{\hbar}{2}}; \quad g = 0$$

$$S_z \,\Psi_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \Psi_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \Psi_- \begin{pmatrix} f \\ h \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow f = 0, \quad \boxed{h = -\frac{\hbar}{2}}$$

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

Finalmente, também podemos definir

$$S_\pm \equiv S_x \pm i S_y$$

e, portanto, temos que

$$S_\pm |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)}\, |s, m \pm 1\rangle$$

o que implica que, por exemplo

$$S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \sqrt{\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right) - \left(-\tfrac{1}{2}\right)\left(-\tfrac{1}{2}+1\right)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

e, similarmente,

$$S_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \sqrt{\tfrac{3}{4} - \left(\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-1\right)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

Além de

$$\left\{ \begin{array}{l} S_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\ S_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \end{array} \right.$$

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

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{e} \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) = -i\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \right\}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array} \right\}$$

ou $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, onde

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

SÃO as matrizes de Pauli.

S_x, S_y, S_z e S^2 são matrizes

Ok. Representam observáveis físicos

Já S_+ e S_- não são hermitianas

os espinores:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad e \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

são os autoestados de S_z, com autovalores $\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$ respectivamente.

Em geral, uma partícula de $s = 1/2$ estará numa combinação linear

$$\chi = a\chi_+ + b\chi_-$$

(Nota: a dependência em $\vec{r}$ foi fatorizada. Ver abaixo)

Normalizando o espinor χ resulta em

$$\chi^\dagger \chi = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

onde usamos que $\chi_+^\dagger \chi_+ = 1 = \chi_-^\dagger \chi_-$

e $\chi_\pm^\dagger \chi_\mp = 0$

A probabilidade de obter $+\frac{\hbar}{2}$ se medimos (14)

S_z é $|a|^2$, de obter $-\frac{\hbar}{2}$ é $|b|^2$.

Mas e se medimos S_x?

Os autovalores ~~possíveis~~ de S_x são:

$$\det\left(S_x - \lambda \mathbb{I}\right) = 0 \Rightarrow \det\begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \boxed{\lambda_{1,2} = \pm\frac{\hbar}{2}} \checkmark \quad \text{Mesmos!}$$

Autoespinores de S_x?

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} v_2 \\ v_1 \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \boxed{V_2 = \pm V_1}$$

$$\Rightarrow v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ normalizar} \Rightarrow |V_1|^2 (1 \;\; -1)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 1$$

$$\Rightarrow |V_1|^2\, 2 = 1 \Rightarrow \boxed{V_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}}$$

$\Rightarrow$ autoespinores de S_x: $\chi_+^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$; $\chi_-^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$