



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO – UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS DE SÃO BERNARDO
CURSO DE LICENCIATURA EM CIÊNCIAS NATURAIS – QUÍMICA

FRANCISCO JOSÉ SILVA DOS SANTOS

**A INCORPORAÇÃO DO SPIN DO ELÉTRON NA MECÂNICA QUÂNTICA:
DE SCHRODINGER À EQUAÇÃO DE PAULI**

São Bernardo – MA

2023

FRANCISCO JOSÉ SILVA DOS SANTOS

**A INCORPORAÇÃO DO SPIN DO ELÉTRON NA MECÂNICA QUÂNTICA:
DE SCHRODINGER À EQUAÇÃO DE PAULI**

Monografia apresentada ao Curso de Ciências Naturais/Química da Universidade Federal do Maranhão – UFMA, Centro de Ciências de São Bernardo, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Ciências Naturais/Química.

Orientador: Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues

**São Bernardo – MA
2023**

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

Santos, Francisco José Silva dos.

A incorporação do spin do elétron na mecânica
quântica:

de schrodinger à equação de pauli / Francisco José Silva
dos Santos. - 2023.

40 p.

Orientador(a): Josberg Silva Rodrigues.

Monografia (Graduação) - Curso de Ciências Naturais -
Química, Universidade Federal do Maranhão, São Bernardo,
2023.

1. Equação de Pauli. 2. Equação de Schrödinger. 3.
Mecânica quântica. 4. O átomo de hidrogênio. 5. Spin do
elétron. I. Rodrigues, Josberg Silva. II. Título.

FRANCISCO JOSÉ SILVA DOS SANTOS

**A INCORPORAÇÃO DO SPIN DO ELÉTRON NA MECÂNICA QUÂNTICA:
DE SCHRODINGER À EQUAÇÃO DE PAULI**

Monografia apresentada ao Curso de Ciências Naturais/Química da Universidade Federal do Maranhão – UFMA, Centro de Ciências de São Bernardo, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Ciências Naturais/Química.

Aprovada em: 22/12/2023

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues (orientador)
Doutor em Física Teórica – UFMA
UFMA – Campus São Bernardo

Prof. Dr. Marcos Lima Dias
Doutor em Física Teórica – UFMA
IFPA – Campus Marabá Rural

Prof. Dr. Thiago Targino Gurgel
Doutor em Física – UFMA
UFMA – Campus São Bernardo

“Um guerreiro nunca volta atrás com a sua palavra. Supere os seus limites aqui e agora. Você não tem outra opção.”

(Yami Sukehiro).

AGRADECIMENTOS

Clamo minha sincera gratidão a todos que desempenharam um papel essencial nesta jornada e contribuíram para o êxito deste trabalho:

Em primeiro lugar, expresso meu agradecimento a Deus, fonte da minha existência, cuja orientação e fé foram fundamentais para alcançar meus objetivos. Sem Sua guia, nada seria possível e não estaria onde estou hoje. Dedico-Lhe minha mais profunda gratidão.

À minha família, meu porto seguro, manifesto minha imensa gratidão. Sem o apoio constante, a força e os sacrifícios de minha mãe, pai e irmãos, não teria superado os obstáculos e realizado meus sonhos. Eles foram essenciais em cada etapa deste percurso.

Ao meu orientador, Professor Josberg Silva Rodrigues, expresso minha sincera gratidão pela orientação, conselhos e apoio inestimável durante a elaboração deste trabalho. Sua sabedoria, direção e amizade foram essenciais para minha jornada acadêmica, transformando-se não apenas em um guia acadêmico, mas também em um grande amigo.

Expresso meu agradecimento à instituição educacional por proporcionar não apenas conhecimento, mas também oportunidades significativas para o meu crescimento acadêmico e pessoal. Agradeço aos professores, que me proporcionaram grandes desafios e sabedoria durante os quatro anos de curso.

A todos que fizeram parte desta jornada, meu mais profundo agradecimento. Sozinho, não teria alcançado este marco significativo em minha vida.

RESUMO

Inicialmente, a mecânica quântica surgiu para resolver problemas além do escopo das teorias clássicas, como a emissão espectral do corpo negro. Um desafio significativo foi a necessidade de incorporar o spin do elétron, uma propriedade intrínseca não contemplada pela equação de Schrödinger. Além disso, no âmbito deste trabalho, foi realizada a aplicação da equação de Schrodinger ao átomo de hidrogênio, evidenciando como esta formulação desempenha um papel crucial na compreensão dos estados eletrônicos em sistemas simples e na exploração das propriedades atômicas e moleculares. Investigamos em um contexto não relativístico o desenvolvimento do conceito de spin, partindo das formulações iniciais de Schrodinger até sua inclusão na equação de Pauli. Destacamos a relevância fundamental do spin para uma compreensão mais abrangente e precisa do comportamento dos elétrons, um pilar essencial tanto na Física quanto na Química, e intimamente relacionado a tópicos como magnetismo ou ferromagnetismo. Por fim, analisamos como as funções de onda, sob a forma matriz coluna com duas componentes, representam partículas com spin em contextos não relativísticos, uma perspectiva crucial para entender fenômenos como o efeito Zeeman. Concluimos com uma reflexão sobre o experimento histórico que comprovou a existência do spin do elétron, marcando um momento de extrema importância tanto para a Física Quântica quanto para o avanço da Química Moderna.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger; Equação de Pauli; O átomo de hidrogênio; Spin do elétron.

ABSTRACT

Initially, quantum mechanics arose to solve problems beyond the scope of classical theories, such as blackbody spectral emission. A significant challenge was the need to incorporate electron spin, an intrinsic property not covered by the Schrodinger equation. Furthermore, within the scope of this work, the Schrodinger equation was applied to the hydrogen atom, highlighting how this formulation plays a crucial role in understanding electronic states in simple systems and exploring atomic and molecular properties. We investigate in a non-relativistic context the development of the concept of spin, starting from Schrodinger's initial formulations until its inclusion in the Pauli equation. We highlight the fundamental relevance of spin for a more comprehensive and precise understanding of the behavior of electrons, an essential pillar in both Physics and Chemistry, and closely related to topics such as magnetism or ferromagnetism. Finally, we analyze how wave functions, in the form of Pauli spinors, represent particles with spin in non-relativistic contexts, a crucial perspective for understanding phenomena such as the Zeeman effect. We conclude with a reflection on the historical experiment that proved the existence of the electron spin, marking a moment of extreme importance both for Quantum Physics and for the advancement of Modern Chemistry.

Keywords: Schrödinger; equation; Pauli equation; The hydrogen atom; Electron spin.

Lista de Figuras

Figura 1- Coordenadas Esféricas

Figura 2- Torque, momento de dipolo magnético e campo magnético

Figura 3-Transições Zeeman sem e com Campo Magnético

Figura 4-Transições Zeeman Anômalo: sem e com Campo Magnético

Figura 5- Diagrama do Experimento Stern-Gerlach

Lista de Símbolos

i	Unidade Imaginária
$\hbar$	Constante de Planck reduzida
ω	Frequência angular
ν	Frequência
p	Momento linear de uma partícula
λ	Comprimento de onda
k	Número de onda
m	Massa de uma partícula
$\Psi(x)$	Função de onda em mecânica quântica
Δ	Operador laplaciano
∇	Operador gradiente
H	Hamiltoniano (energia total)
$\hat{H}$	Hamiltoniano operador em mecânica quântica
∇	Operador diferencial tridimensional
$V(x)$	Potencial dependente da posição
$n(x)$	Índice de refração em termos mecânicos
k_0	Número de onda em um meio sem campo
r	Coordenada radial
A	Constante de normalização da função de onda
$\vec{L}$	Momento angular orbital
$\vec{S}$	Momento angular de spin
$\hat{r}$	Operador de posição
$\hat{p}$	Operador de momento linear
$\hat{L}$	Operador de momento angular
σ_i	Matrizes de spin de Pauli
$\vec{B}$	Campo magnético
$\vec{A}$	Potencial vetor magnético
μ_l	Momento de dipolo magnético orbital
μ_s	Momento de dipolo magnético de spin
n	Número quântico principal
j	Número quântico total
m	Número quântico magnético
μ_B	Magneton de Bohr

Sumário

Sumário

1	Introdução	2
2	Referencial Teórico	4
2.1	Equação de Schrödinger	4
2.1.1	Equação de Schrödinger para Estados Estacionários	4
2.1.2	Dedução a partir da Relação Ótico-Mecânica	5
2.2	O Átomo de Hidrogênio	6
2.2.1	Estado Fundamental do Átomo de Hidrogênio	6
2.2.2	Momento Angular	11
2.2.3	Teoria Semi-clássica para o Efeito Zeeman Normal	12
2.2.4	Formalismo Ondulatório	13
2.2.5	Transições Óticas e Polarização no Efeito Zeeman	15
2.3	Equação de Pauli	17
2.4	Efeito Zeeman Anômalo	19
2.5	Experimento de Stern-Gerlach	21
3	Metodologia	23
3.1	Seleção dos Sites Acadêmicos	24
3.2	Levantamento Bibliográfico	24
4	Análise Crítica das Fontes	25
5	Considerações Finais	26
	Referências	28

1 Introdução

A Mecânica Quântica, um campo que se desdobra em mistérios e inovações, nasceu da necessidade de responder a fenômenos não elucidados pela Física Clássica, como a emissão espectral do corpo negro. Neste contexto, a inserção do spin do elétron na equação de Schrödinger representou um avanço essencial e significativo, proporcionando um novo horizonte para a compreensão dos fenômenos quânticos (NUSSENZVEIG, 2014).

Conforme destacado por Leite Lopes (1992), a jornada da mecânica quântica foi marcada pela busca de uma descrição mais abrangente dos fenômenos atômicos e moleculares. A descoberta experimental por G. E. Uhlenbeck e S. Goudsmit em 1925 que cada elétron possui um spin foi crucial neste percurso e de fundamental importância para o avanço da Física Teórica bem como para a Química Quântica.

No contexto da equação de Schrödinger, abordamos e solucionamos o átomo de hidrogênio, o átomo mais simples da natureza, que ajuda a compreender de forma didática a compreensão os números quânticos dos estados eletrônicos (GRIFFITHS, 2004). Também analisamos a partir da teoria semi-clássica e da teoria ondulatória o efeito Zeeman normal (AEGERTER,1985; DONOSO; NASCIMENTO,1990).

Posteriormente, investigamos a inclusão do spin na Mecânica Quântica não relativística (MQNR), culminando na equação de Pauli que abriu caminho para novas descobertas e teorias (PAULI, 1927). O estudo das partículas com spin, especialmente em cenários não relativísticos, e sua representação através dos espinores de Pauli são essenciais para entender fenômenos como o efeito Zeeman Anômalo ((AEGERTER,1985; DONOSO; NASCIMENTO,1990).

A comprovação pelo experimento histórico de Stern-Gerlach da existência do spin do elétron foi um marco que não apenas corroborou a Mecânica Quântica, mas também impulsionou o desenvolvimento da Física Teórica bem como o desenvolvimento da Química Moderna (CRESSER, 2009).

A equação de Pauli foi um passo significativo que diminuiu a lacuna entre a Mecânica Quântica não relativística original de Schrödinger e a formulação relativística de Dirac. A contribuição de Pauli foi essencial para a teoria quântica, fornecendo uma descrição mais completa e precisa dos átomos, especialmente em sistemas onde os efeitos do spin são não triviais (LEITE LOPES ,1992).

A equação de Dirac representou um avanço teórico significativo, unindo as ideias de Schrödinger, Pauli e Einstein. Esta equação não apenas previu a existência do pósitron, mas também integrou a mecânica quântica com a teoria da relatividade especial, demonstrando a interdisciplinaridade entre estas áreas (DIRAC, 1928).

Esta monografia está dividida da seguinte forma: inicialmente, nos debruçamos sobre a equação de Schrödinger, iniciando com uma análise e derivação da equação pelos estados estacionários e pela relação ótico-mecânica. Esta seção servirá como alicerce para compreender a conexão entre os princípios da Física Clássica e Quântica. Em seguida, o foco se voltará para o átomo de Hidrogênio, uma peça chave para entender origem dos números quânticos e os conceitos dos estados quânticos. Esta parte abordará o estado fundamental do átomo de hidrogênio, seguido por uma exploração do momento angular. A teoria semi-clássica e o formalismo ondulatório serão aplicados para a compreensão do efeito Zeeman normal, destacando as transições óticas e a polarização associada.

A próxima etapa será a análise da equação de Pauli, que incorporou o conceito de spin do elétron na MQNR. A monografia examinará o impacto desta equação na compreensão dos fenômenos quânticos, levando à discussão sobre o efeito Zeeman anômalo, um tema complexo que revela as nuances do comportamento dos elétrons sob influência de campos magnéticos.

Além disso, será discutido o experimento de Stern-Gerlach para ilustrar experimentalmente a quantização do spin do elétron, um marco na Física Quântica.

Na seção de Metodologia, a monografia detalhará os objetivos da pesquisa, a seleção de sites acadêmicos e o levantamento bibliográfico, assegurando uma base sólida e confiável para a pesquisa.

Por fim, temos as considerações finais, refletindo sobre as implicações e a relevância dos estudos abordados, e as perspectivas futuras.

2 Referencial Teórico

2.1 Equação de Schrödinger

2.1.1 Equação de Schrödinger para Estados Estacionários

A equação de Schrödinger para estados estacionários, também conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo, é uma equação fundamental na Mecânica Quântica que descreve como o estado quântico de um sistema físico é caracterizado no espaço, mas varia com o tempo. É também uma das formas mais simples de dedução da equação de Schrödinger (NUSSENZVEIG, 2014)

Iniciamos com a Equação de Planck que relaciona a energia de um fóton (E) com sua frequência (ν), dada pela equação:

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad (1)$$

onde:

h : é a constante de Planck. Seu valor é aproximadamente $6,62607015 \times 10^{-34}$ J.s

ν : é a frequência do fóton, no S.I expressa em hertz (Hz).

$\hbar$: é a constante reduzida de Planck, ou constante de Dirac ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$).

ω : representa a frequência angular do fóton, relacionada à frequência linear por $\omega = 2\pi\nu$.

Em seguida apresentamos a equação de Broglie que relaciona o momento de uma partícula (p) com seu comprimento de onda (λ):

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (2)$$

Ao mesmo tempo, para uma partícula livre de massa m , temos a energia cinética clássica dada por

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (3)$$

com a energia potencial de interação sendo nula.

Por outro lado, a equação de ondas monocromáticas de números de onda k é, em três dimensões expressa por:

$$(\Delta + k^2)\Psi(\vec{r}) = 0, \quad (4)$$

em que $\vec{r}$ representa o vetor posição no espaço tridimensional, em coordenadas cartesianas (x, y, z) .

Usando as equações (2) e (3),

$$\Delta\Psi = -k^2\Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{p^2}{2m}\Psi, \quad (5)$$

obtemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (6)$$

que é a equação de Schrödinger para estados estacionários, ou seja, independente do tempo. Em que $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, conhecido como operador laplaciano.

Além disso, tendo um papel fundamental, o princípio de correspondência que afirma que as leis da Física Quântica devem convergir para as da física clássica sob certas condições. Isso implica que os operadores quânticos correspondem às variáveis clássicas:

$$\hat{p} \rightarrow -i\hbar\nabla, \quad \hat{H} \rightarrow \hat{H} \quad (7)$$

em que $\hbar$ é a constante de Planck reduzida e ∇ o operador gradiente.

2.1.2 Dedução a partir da Relação Ótico-Mecânica

Na óptica, o índice de refração é uma propriedade física fundamental que descreve como a luz ou qualquer outra radiação eletromagnética se propaga através de um meio material. Analogamente, na Mecânica Quântica, podemos relacionar o índice de refração com o potencial mecânico que uma partícula experimenta em um campo de forças. Essa analogia nos permite transpor conceitos ópticos para a Mecânica Quântica, levando à formulação da equação de Schrödinger que descreve o comportamento ondulatório das partículas (NUSSENZVEIG, 2014).

Iniciamos com a expressão clássica da energia total de uma partícula,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (8)$$

sendo que E representa a energia total, p o momento, m a massa, e $V(x)$ o potencial dependente da posição.

Introduzimos o índice de refração $n(x)$, expresso em termos mecânicos:

$$n(x) = \sqrt{1 - \frac{V(x)}{E}}, \quad (9)$$

em que $V(x)$ é o potencial e E a energia total. Essa relação estabelece um elo entre o comportamento ondulatório (óptico) e as propriedades mecânicas da partícula, essencial para conectar ótica e mecânica.

Consideramos uma equação que é análoga à equação de onda em ótica:

$$(\Delta + n^2(x)k_0^2)\Psi(x) = 0, \quad (10)$$

Δ é o operador laplaciano (∇^2) e $\Psi(x)$ a função de onda. Essa equação descreve a propagação de ondas em um meio com índice de refração variável.

Expressamos o número de onda k_0 em termos do momento e da energia:

$$k_0^2 = \frac{p_0^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}E. \quad (11)$$

Substituímos $n(x)$ e k_0^2 na equação de onda e rearranjamos para obter a forma da equação de Schrödinger:

$$\Delta\Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi(x) = 0 \quad (12)$$

ou podemos expressar como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (13)$$

esta é a forma fundamental da equação de Schrödinger na mecânica quântica, que descreve a evolução temporal de um estado quântico.

2.2 O Átomo de Hidrogênio

2.2.1 Estado Fundamental do Átomo de Hidrogênio

O átomo de hidrogênio em seu estado fundamental é um exemplo fascinante na física quântica, combinando características fundamentais com intrigantes complexidades. Como o

átomo mais simples, composto apenas por um único próton e um elétron, sua estrutura básica é facilmente compreensível. No entanto, a análise detalhada de seu comportamento quântico, especialmente através da equação de Schrödinger, revela uma complexidade matemática e física significativa.

No estado fundamental, o elétron ocupa o nível de energia mais baixo possível, o orbital 1s, onde a probabilidade de encontrar o elétron é maior ao redor do núcleo. Esse modelo simples fornece a base para entender estruturas atômicas mais complexas e ilustra princípios fundamentais da Mecânica Quântica, como a quantização de energia e a dualidade onda-partícula (GRIFFITHS, 2004).

Sabemos que a equação de Schrödinger independente do tempo é expressa por

$$\hat{H}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + V(r)\varphi = E\varphi. \quad (14)$$

Para uma carga pontual temos que o potencial elétrico é dado por

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv -\frac{q^2}{r}. \quad (15)$$

Para simplificação definimos a massa reduzida para o sistema de duas partículas,

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}, \quad (16)$$

cujas energia total do estado estacionário assume um valor negativo

$$E = -|E|. \quad (17)$$

A função de onda depende apenas da distância radial r :

$$\varphi = \varphi(r), \quad (18)$$

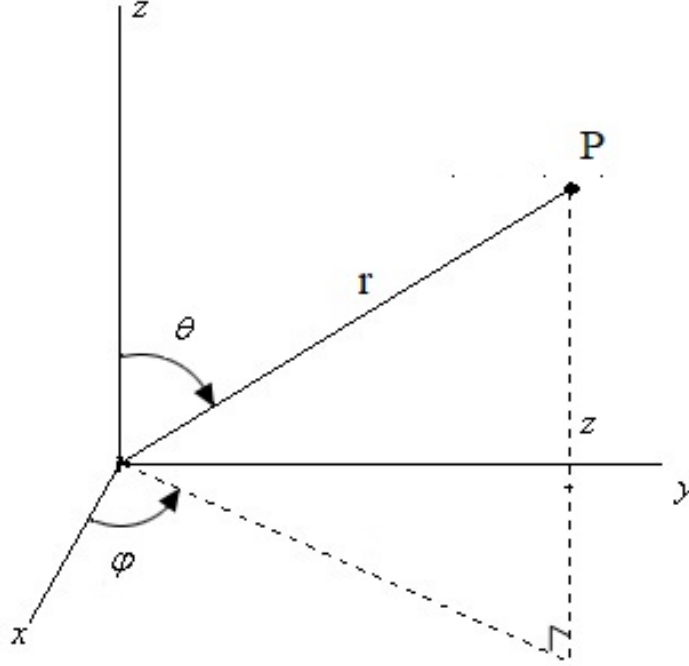
em que r é definido em termos das coordenadas cartesianas x, y, z como:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (19)$$

Calculando a relação entre as derivadas parciais e totais da função de onda obtemos:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{d\varphi}{dr} \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \varphi'(r) \Rightarrow \nabla\varphi = \mathbf{r} \frac{d\varphi/dr}{r}. \quad (20)$$

Figura 1: Coordenadas esféricas



Fonte: Autoria própria.

O cálculo do operador laplaciano em coordenadas esféricas é expresso abaixo por

$$\Delta\varphi = \nabla \cdot (\nabla\varphi) = \frac{d\varphi/dr}{r} \nabla \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} \right), \quad (21)$$

e a divergência do vetor posição,

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial z} = 3, \quad (22)$$

sendo o gradiente $\left(\frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr}\right)$ dado por:

$$\nabla \left(\frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} \right) = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} \right) = \frac{\mathbf{r}}{r} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d\varphi}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2\varphi}{dr^2} \right]. \quad (23)$$

Cujo Laplaciano da função de onda em coordenadas esféricas é

$$\Delta\varphi = \frac{3}{r} \frac{d\varphi}{dr} - \frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} + \frac{d^2\varphi}{dr^2} \Rightarrow \Delta\varphi(r) = \frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr}. \quad (24)$$

Inserindo o Laplaciano na Equação de Schrödinger obtemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} \right) - \frac{q^2}{r} \varphi = -|E| \varphi, \quad (25)$$

essa equação resultante relaciona a energia do elétron, o potencial elétrico e as propriedades da função de onda radial para o átomo de hidrogênio.

Definição do módulo da energia em termos de uma constante K

$$|E| \equiv \frac{\hbar^2}{2m} K^2. \quad (26)$$

Definido a_0 como o raio de Bohr, um parâmetro fundamental que determina a escala de tamanho do átomo de hidrogênio, que se relaciona com as constantes da seguinte maneira

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{mq^2}. \quad (27)$$

Dessa forma, a equação radial para o átomo de hidrogênio fica

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} + \frac{2}{a_0 r} \varphi - K^2 \varphi = 0. \quad (28)$$

Esta é uma equação diferencial para a função de onda φ . Ela descreve como φ varia com a distância radial r , levando em conta o potencial elétrico e a energia cinética.

Quando se considera o limite assintótico, a equação (28) é simplificada para

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} - K^2 \varphi = 0. \quad (29)$$

A solução geral para φ quando r tende ao infinito ($r \rightarrow \infty$) é expressa como:

$$\varphi \rightarrow Ae^{-Kr} + Be^{Kr}. \quad (30)$$

A e B são constantes a serem determinadas pelas condições de contorno.

Esta equação apresenta uma forma específica para a função de onda φ , dada por

$$\varphi(r) = Ne^{-Kr}, \quad (31)$$

em que N é uma constante de normalização.

Aqui, estabelece-se uma relação entre a constante K e o raio de Bohr a_0 , que define a escala do problema.

$$K = 1/a_0, \quad (32)$$

$$|E| = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}. \quad (33)$$

Essa equação expressa a magnitude da energia do estado em função do raio de Bohr, relacionando a energia com as propriedades fundamentais do átomo.

A função de onda deve ser normalizada, ou seja, a probabilidade total de encontrar o elétron em algum lugar no espaço é 1.

$$1 = \int |\varphi(r)|^2 d^3r = 4\pi \int_0^\infty |\varphi(r)|^2 r^2 dr = 4\pi |N|^2 \cdot \int_0^\infty e^{-2Kr} r^2 dr \quad (34)$$

Determinamos o valor da constante de normalização N da função de onda,

$$1 = \frac{4\pi |N|^2}{4K^3} = \frac{\pi |N|^2}{(1/a_0)^3} = \pi a_0^3 |N|^2 \quad \left\{ \quad N = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \right. \quad (35)$$

essencial para que a interpretação probabilística da mecânica quântica seja válida.

A forma final da função de onda para o estado fundamental do átomo de hidrogênio fica sendo,

$$\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad (36)$$

em que a probabilidade de encontrar o elétron diminui exponencialmente com a distância do núcleo.

A parte esférica, cuja a probabilidade diferencial de encontrar o elétron em uma casca esférica de raio r e espessura dr

$$dP = 4\pi r^2 |\varphi(r)|^2 dr = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr, \quad (37)$$

A equação que determina o raio mais provável em que o elétron pode ser encontrado, igual ao raio de Bohr a_0

$$0 = \frac{d}{dr} (r^2 e^{-2r/a_0}) = 2r e^{-2r/a_0} - \frac{2}{a_0} r^2 e^{-2r/a_0} = 2r e^{-2r/a_0} \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) \quad (38)$$

$$r = a_0 \quad \left\{ \left(\frac{dP}{dr} \right)_{\max} = \frac{4}{a_0} e^{-2} \right. \quad (39)$$

que dá a probabilidade máxima de encontrar o elétron a uma distância a_0 do núcleo, que é o valor mais provável para o raio no estado fundamental.

A expressão do potencial elétrico efetivo, que é negativo e decresce com a distância, refletindo a atração entre o elétron e o núcleo é expresso pela lei de Coulomb:

$$V(r) = -\frac{q^2}{r}. \quad (40)$$

Podemos estimar a energia cinética do elétron em termos da incerteza no momento Δp e da massa reduzida do sistema.

$$T(r) \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2mr^2}. \quad (41)$$

A energia total do elétron é expressa como a soma da energia cinética e do potencial elétrico,

$$E(r) = T(r) + V(r) \gtrsim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{q^2}{r} \quad (42)$$

assim temos

$$0 = \frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{q^2}{r^2} = \frac{q^2}{r^2} \left(1 - \frac{\hbar^2/mq^2}{r}\right) \quad \{r = a_0, \quad (43)$$

esta equação estabelece a condição para a energia mínima do elétron.

2.2.2 Momento Angular

O momento angular é uma propriedade fundamental na mecânica quântica, especialmente no estudo do átomo de hidrogênio. Representado por $\hat{\mathbf{I}}$, é definido em termos das coordenadas de posição $\hat{\mathbf{r}}$ e do momento linear $\hat{\mathbf{p}}$. Matematicamente, é expresso pelo produto vetorial dessas duas quantidades. A expressão quantizada do momento angular é dada por:

$$\hat{\mathbf{I}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \hat{\mathbf{r}} \times \nabla \quad (44)$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck reduzida e ∇ denota a função gradiente.

No átomo de hidrogênio, o momento angular desempenha um papel crucial na determinação dos estados permitidos do elétron. Considerando uma função de onda $\varphi(r)$, que depende apenas da coordenada radial r , o operador momento angular atua sobre esta função como segue:

$$\hat{\mathbf{I}}\varphi(r) = -i\hbar \hat{\mathbf{r}} \times \nabla \varphi(r) = -i\hbar \hat{\mathbf{r}} \times \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d\varphi}{dr} = 0 \quad (45)$$

Esta equação sugere que, para funções de onda que dependem apenas de r , o momento angular é nulo, o que implica em estados específicos de momento angular no átomo de hidrogênio.

2.2.3 Teoria Semi-clássica para o Efeito Zeeman Normal

O efeito Zeeman normal é caracterizado pela ausência de spin atômico ($S = 0$), com o momento magnético sendo unicamente devido ao momento angular orbital do elétron. Neste cenário, um campo magnético externo interage com o momento angular orbital L , resultando na divisão do estado de energia em $2l + 1$ níveis igualmente espaçados.

Esse fenômeno pode ser elucidado por um modelo semi-clássico, no qual elétrons, com massa m_0 e carga $-e$, movem-se em órbitas circulares a uma velocidade v . Uma corrente elétrica é gerada pela circulação de cargas na órbita, dada por:

$$i = \frac{q}{T} = \frac{-ev}{2\pi r} \quad (46)$$

onde r é o raio da órbita. Essa corrente induz um campo magnético equivalente ao de um dipolo magnético no centro da órbita. Se A representa a área da órbita, o momento magnético é expresso por:

$$\mu = \frac{i}{c} A = -\frac{evr}{2c} = -\frac{e}{2m_0c} L \quad (47)$$

L é o momento angular orbital, definido por $L = mvr$.

Quando um dipolo magnético é exposto a um campo magnético externo $\vec{B}$, ele experimenta um torque magnético $\vec{\mu} \times \vec{B}$, que tende a alinhar o dipolo com o campo. Isso implica que um dipolo magnético num campo uniforme possui uma energia potencial associada:

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_0c} LB \quad (48)$$

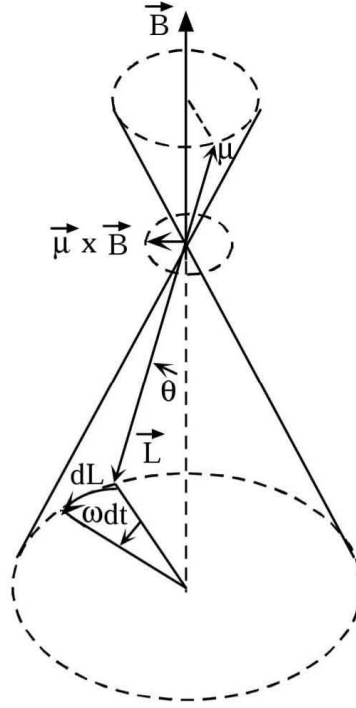
No entanto, a orientação de $\vec{L}$ em relação a $\vec{B}$ é quantizada. Assumindo o campo magnético ao longo do eixo $\hat{z}$, as projeções de $\vec{L}$ sobre $\hat{z}$ só podem assumir valores discretos:

$$m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l \quad (49)$$

A energia de um estado quantizado, definido pelo número quântico magnético m , na presença de um campo magnético, é então:

$$\Delta E = -\mu_B m B \quad (50)$$

Figura 2: Torque, momento de dipolo magnético e campo magnético



Fonte: Aegerter; Donoso; Nascimento, 1985; 1990.

onde $\tilde{\mu} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$, e μ_B é o magneton de Bohr, dado por:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} = 9.2741 \times 10^{-24} \text{J/T} = 5.7884 \times 10^{-9} \text{eV/G} \quad (51)$$

O campo magnético aplicado causa a divisão dos níveis de energia em $2l + 1$ componentes, com uma separação energética de $\mu_B B$.

2.2.4 Formalismo Ondulatório

A mecânica ondulatória oferece outra perspectiva para entender o efeito Zeeman. Consideremos o movimento de um elétron (massa m_e) no campo central do núcleo. Na presença de um campo magnético externo $\vec{B}$, o hamiltoniano do sistema é:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - eV. \quad (52)$$

Aqui, eV representa a energia potencial elétrica, e $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, em que $\vec{A}$ é o potencial vetor magnético. Fazendo a escolha de calibre de Coulomb $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, o Hamiltoniano correspondente é:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + \frac{\hbar e}{m_e c} \left(\vec{A} \cdot \nabla \right) - eV. \quad (53)$$

Escolhendo o campo magnético na direção z , com as componentes do vetor potencial dadas por $A_x = -\frac{1}{2}B_y$, $A_y = \frac{1}{2}B_z$, $A_z = 0$, a equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$ descreve o movimento de um elétron atômico sob a influência combinada do campo coulombiano e do campo magnético:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}E_m\psi + \frac{2ie}{\hbar c} \left(\frac{1}{2}B \frac{d\psi}{dj} \right) + \frac{2m_e e^2}{\hbar^2 r}\psi = 0. \quad (54)$$

A solução geral para esta equação é:

$$\psi(r, \Theta, \varphi) = R(r)P_l^m(\cos \Theta)e^{\pm im\varphi}. \quad (55)$$

Sendo que:

$R(r)$ é a função radial, dependente apenas da distância radial r , e é caracterizada pelos números quânticos n e l . Ela tem a forma geral:

$$R_{nl}(r) = r^l e^{-r/n} L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n),$$

sendo L_{n-l-1}^{2l+1} os polinômios de Laguerre associados.

$P_l^m(\cos \Theta)$ são as funções associadas de Legendre, parte da solução que depende do ângulo polar Θ e são caracterizadas pelos números quânticos l e m .

$e^{\pm im\varphi}$ é a parte da função de onda que depende do ângulo azimutal φ , representando as funções harmônicas circulares.

Considerando somente o último fator na equação (54), ou seja, a apenas a dependência da função de onda em φ , temos:

$$\Delta\varphi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E_m \pm m \frac{\hbar e}{2m_e c} B + \frac{ze^2}{r} \right) \varphi = 0 \quad (56)$$

sendo m o número quântico magnético, que pode assumir valores $-l, -l+1, \dots, l-1, l$. Para um valor específico de l , a solução da equação de onda é a mesma, com ou sem campo aplicado, se a condição a seguir for satisfeita:

$$E_m = E_0 \pm m \frac{\hbar e}{2m_e c} B \quad (57)$$

E_0 representa o nível de energia na ausência de campo magnético. Portanto, a diferença de energia entre dois níveis consecutivos, m e $m + 1$, é $\mu_B B$, alinhando-se com o resultado clássico da equação anterior.

2.2.5 Transições Óticas e Polarização no Efeito Zeeman

Os autores Aegerter (1985) e Donoso; Nascimento (1990) discutem o Efeito Zeeman das transições óticas, como entre os níveis 1D - 1P de um metal alcalino, revelam aspectos intrigantes do efeito Zeeman. Sob regras de seleção para transições de dipolo elétrico, observa-se o surgimento de múltiplas linhas espectrais em vez de uma única, especialmente quando um campo magnético está presente. Essas linhas se agrupam em três categorias com base na mudança do número quântico magnético Δm :

1. Linhas com $\Delta m = 0$ permanecem na posição espectral original.
2. Linhas com $\Delta m = -1$ se deslocam para frequências mais baixas.
3. Linhas com $\Delta m = +1$ se deslocam para frequências mais altas.

Além disso, a luz emitida em experimentos Zeeman possui propriedades de polarização específicas. Quando observada paralelamente à direção do campo, as transições com $\Delta m = \pm 1$ resultam em polarização circular. Transições com $\Delta m = 0$, observadas perpendicularmente à direção do campo, produzem luz linearmente polarizada.

A intensidade das componentes de polarização varia conforme a direção de observação em relação ao campo magnético. Esta variação pode ser explicada pela interação do campo com a radiação emitida pelos elétrons acelerados.

O efeito Zeeman tem implicações significativas na Física Atômica e Molecular. Ele permite uma investigação detalhada das estruturas de níveis de energia atômicos e a interação entre campos magnéticos e elétrons. Além disso, o efeito Zeeman é fundamental em diversas aplicações práticas:

- Medição precisa de campos magnéticos.
- Análise da composição química e propriedades físicas de estrelas e outros objetos astronômicos.
- Estudos sobre a estrutura fina e hiperfina em espectros atômicos.

Transições Zeeman normal: sem e com campo magnético

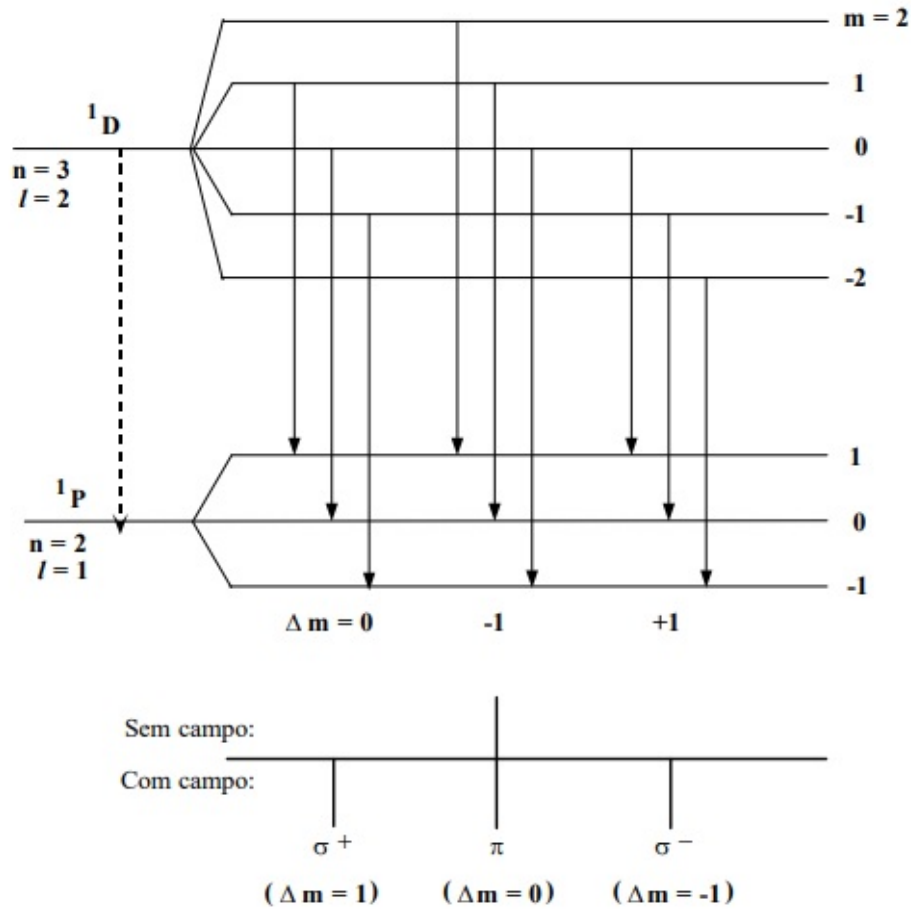


Figura 3:

Fonte: Aegerter; Donoso; Nascimento, 1985; 1990.

O efeito Zeeman normal, uma manifestação da interação entre campos magnéticos e elétrons do átomo, oferece uma janela fascinante para o estudo de fenômenos atômicos e moleculares. Através da análise de como os níveis de energia atômicos são influenciados por campos magnéticos externos, podemos obter informações robustas sobre a estrutura atômica e molecular. Este fenômeno, pode ser explorado tanto por abordagens semi-clássicas quanto por formalismos ondulatórios e como veremos adiante dentro do contexto do surgimento do spin.

2.3 Equação de Pauli

Partindo da Hamiltoniana dada:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi \quad (58)$$

e utilizando a equação de Schrödinger:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (59)$$

queremos desenvolver a equação de Pauli de primeira ordem.

Substituindo a Hamiltoniana na equação de Schrödinger e mantendo os termos de primeira ordem em $\frac{e}{c}$, temos:

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi, \quad (60)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - 2\frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{p} + \left(\frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right) \psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi. \quad (61)$$

Nesta aproximação, também descartamos o termo $\left(\frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi$, pois é de ordem superior, resultando em:

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{p} \cdot \vec{A} \right) \psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi, \quad (62)$$

mas sabemos que devido o operador momento ser uma derivada na posição ($\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$), temos:

$$\vec{p} \cdot (\vec{A}\psi) = (\vec{p} \cdot \vec{A}) \psi + \vec{A} \cdot (\vec{p}\psi),$$

inserindo este termo na equação anterior, temos:

$$\frac{1}{2m} \left[-\hbar \nabla^2 + \frac{2ie\hbar}{c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{ie\hbar}{c} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right] \psi = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right] \psi. \quad (63)$$

Introduzimos as matrizes de Pauli na equação. As matrizes de Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$) são matrizes 2x2 que representam o spin do elétron e são definidas como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (64)$$

das propriedades das matrizes de Pauli é fácil demonstrar o produto escalar com o operador momento,

$$\vec{p}^2 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2, \quad (65)$$

o produto escalar $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ introduz o conceito de spin no contexto do operador de momento linear, alterando a forma como a partícula interage com o campo magnético.

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \neq \frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]^2. \quad (66)$$

O lado direito pode ser calculado, introduzindo uma função de onda com duas componentes $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$. Assim, teremos:

$$\left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] \left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] \psi = \quad (67)$$

$$= \left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 + \frac{e^2}{c^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})^2 - \frac{e}{c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) - \frac{e}{c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \right] \psi \quad (68)$$

$$= \left(\vec{p}^2 + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) \psi - \frac{e}{c} \left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \psi + (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \psi \right] \quad (69)$$

contudo, temos que:

$$\left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \right] \psi = (\sigma_i p^i \sigma_j A^j) \psi = \sigma_i \sigma_j p^i (A^j \psi) = \quad (70)$$

$$= \sigma_i \sigma_j \left[(p^i A^j) \psi + (A^j p^i) \psi \right] \quad (71)$$

fazendo uso de $p^j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$, simplificamos:

$$\left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \right] \psi = \sigma_i \sigma_j (A^i p^j) \psi = \sigma_j \sigma_i A^j p^i \psi, \quad (72)$$

somando as equações anteriores

$$\left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) + (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \right] \psi = \sigma_i \sigma_j (p^i A^j) \psi + (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) A^j p^i \psi. \quad (73)$$

As matrizes de Pauli comutam com o potencial vetor

$$\sigma_i \sigma_j (p^i A^j) \psi + 2 (A_i p^i) \psi = \left\{ \frac{1}{2} [\sigma_i \sigma_j (p^i A^j) + \sigma_j \sigma_i (p^j A^i)] + 2 A_i p^i \right\} \psi = \quad (74)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2} \sigma_i \sigma_j (\partial^i A^j - \partial^j A^i) \psi - i\hbar (\partial_i A^i + 2 A_i \partial^i) \psi = \quad (75)$$

$$= \left[\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} - 2i\hbar (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \right] \psi, \quad (76)$$

de onde usamos o fato que o vetor indução magnético $\vec{B}$ é tal que $B_k = \partial^i A^j - \partial^j A^i$. Assim chegamos ao resultado de Pauli:

$$\frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]^2 \psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi, \quad (77)$$

ou seja,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + (\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + 2\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (78)$$

como a equação de onda não relativística para descrever uma partícula carregada, com spin $\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \partial_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(-i\hbar \partial^j - \frac{e}{c} A^j \right) - \frac{e\hbar}{2mc} \sigma_j B^j + e\phi \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (79)$$

desta forma, o hamiltoniano de Pauli é dado abaixo por:

$$H_p = \frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]^2 + e\phi = \frac{1}{2m} \left[\left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] + e\phi. \quad (80)$$

Observamos um novo termo adicionado à equação de Schrödinger, que é a contribuição do spin. Na formulação original de Schrödinger, o spin do elétron é nulo. A Equação de Pauli modifica isso ao incluir o termo de interação spin-órbita.

$$H_p = \frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]^2 + e\phi. \quad (81)$$

O termo novo aqui é $\frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$, que representa a interação do spin do elétron (representado por $\vec{\sigma}$) com o campo magnético $\vec{B}$. Este termo é fundamental para descrever fenômenos como a divisão das linhas espectrais em campos magnéticos (efeito Zeeman) e é uma contribuição chave que diferencia a equação de Pauli da equação de Schrödinger original.

2.4 Efeito Zeeman Anômalo

No efeito Zeeman anômalo, consideramos tanto o momento angular orbital ($\mathbf{L}$) quanto o momento angular de spin ($\mathbf{S}$) do elétron. Estes contribuem para o momento magnético total do elétron, que interage com o campo magnético externo.

O Hamiltoniano do sistema, que representa a energia total, é modificado na presença de um campo magnético externo e é dado por:

$$H = -(\mu_l + \mu_s) \cdot \mathbf{B}, \quad (82)$$

em que μ_l e μ_s são os momentos de dipolo magnéticos orbitais e de spin, respectivamente, e $\mathbf{B}$ é o campo magnético externo.

Os números quânticos j e m estão relacionados ao momento angular total $\mathbf{J}$ (a soma de $\mathbf{L}$ e $\mathbf{S}$). A energia corrigida devido ao efeito Zeeman é calculada como:

$$E_{1z} = \langle j, m | H | j, m \rangle = \frac{e}{2m_e} \mathbf{B} \cdot \langle \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle. \quad (83)$$

O momento angular total $\mathbf{J}$ é a soma de $\mathbf{L}$ e $\mathbf{S}$. Como $\mathbf{L}$ e $\mathbf{S}$ precessionam em torno de $\mathbf{J}$, o valor esperado de $\mathbf{S}$ é sua projeção ao longo de $\mathbf{J}$:

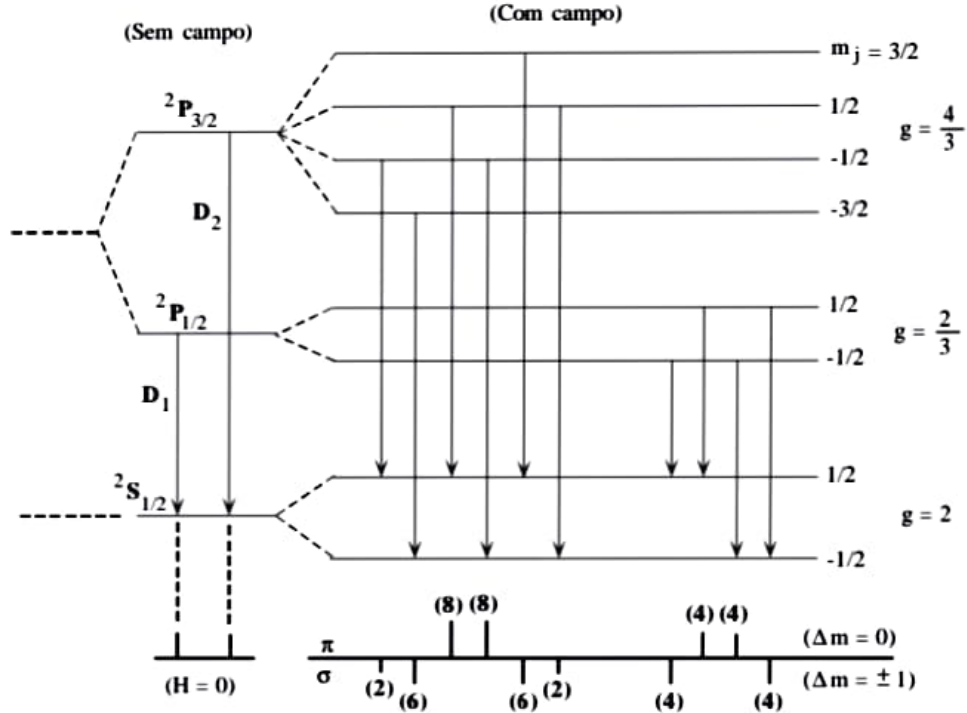
$$\langle \mathbf{S}_{\text{med}} \rangle = \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{J})}{\mathbf{J}^2} \mathbf{J}. \quad (84)$$

Com um pouco mais de álgebra, chegamos:

$$\langle \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle = \left(\frac{1 + j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right) \langle \mathbf{J} \rangle \quad (85)$$

equação esta que revela a interação entre o campo magnético e o spin do elétron no efeito Zeeman anômalo.

Figura 3: Transições Zeeman anômalo: sem e com campo magnético



Fonte: Aegerter; Donoso; Nascimento, 1985; 1990.

Neste caso, o spin é não nulo (j é semi-inteiro), levando o número de subníveis ser par. Portanto a contribuição do spin leva ao efeito Zeeman anômalo

2.5 Experimento de Stern-Gerlach

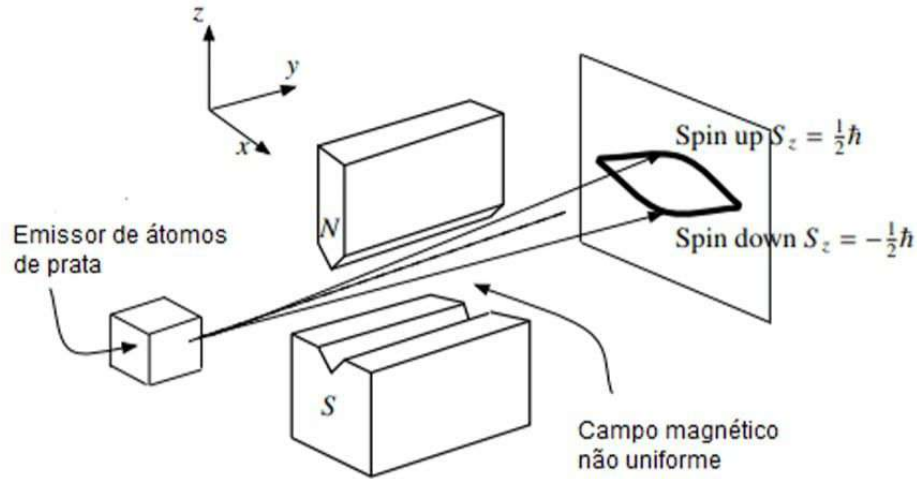
O Experimento de Stern-Gerlach, realizado em 1922, é uma experiência crucial na física. Originalmente, não foi projetado para investigar o spin do elétron, mas sim para explorar a ideia de quantização espacial no modelo atômico de Bohr-Sommerfeld. O conceito de spin foi introduzido mais tarde por George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit em 1925.

No experimento, um feixe de átomos de prata passa por um campo magnético não uniforme e atinge uma placa detectora. Os átomos de prata foram escolhidos por serem neutros, evitando assim a deflexão que partículas carregadas sofreriam em um campo magnético (GRIF-FITHS,2004).

Os átomos com (dipolos magnéticos) e com um momento magnético μ . Quando aplicado

um campo magnético uniforme, as forças nos dois lados do dipolo se equilibram e não afetam o caminho do átomo. Mas, em um campo não uniforme, as forças são desiguais, fazendo com que o átomo se desvie, conforme visto na figura.

Diagrama do experimento de Stern-Gerlach



Fonte: Cresser, 2009.

A energia potencial dos átomos é dada por $E = \mu \cdot B$, resultando em uma força $F = \nabla(\mu \cdot B)$. O gradiente do campo magnético, considerado na direção z , cria uma força F_z dada por:

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (86)$$

Stern conjecturou que se a quantização espacial fosse correta, o momento angular teria valores discretos. Ele pensou que, ao medir o momento magnético, poderia confirmar essa quantização. Ele esperava que o feixe se dividisse em duas partes, baseando-se na ideia de que o elétron de valência no átomo de prata teria momentos magnéticos específicos.

No entanto, os resultados mostraram que os átomos atingiam a placa em apenas dois pontos distintos, desafiando as expectativas da física clássica de uma distribuição contínua. Isso de-

monstrou a quantização espacial, embora na época eles não percebessem que isso estava ligado ao spin do elétron.

Agora, sabemos que o átomo de prata possui 47 elétrons, distribuídos da seguinte forma:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1 \quad (87)$$

O elétron único na camada de valência tem momento angular orbital zero, deixando apenas o momento magnético do spin do elétron. Normalmente, os elétrons se emparelham com spins opostos, anulando o momento magnético. Mas no átomo de prata, o elétron solitário na camada de valência gera um momento magnético, fazendo o átomo se comportar como um pequeníssimo ímã.

Quando o átomo interage com o campo magnético no experimento, ele se move em direção ou contrária ao campo mais intenso, dependendo do spin do elétron de valência. Isso permite medir diretamente o spin S , que pode assumir dois valores:

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (88)$$

O Experimento de Stern-Gerlach demonstrou a existência da quantização espacial e, indiretamente, a existência do spin do elétron.

3 Metodologia

Para a realização deste trabalho, foi adotada uma abordagem fundamentada na pesquisa bibliográfica em sites acadêmicos. A pesquisa bibliográfica é uma prática essencial no meio acadêmico, sendo fundamental para aprimorar e manter atualizado o conhecimento por meio da investigação científica de obras já publicadas. Como indicado por Andrade (2010, p. 25): A pesquisa bibliográfica é habilidade fundamental nos cursos de graduação, uma vez que constitui o primeiro passo para todas as atividades acadêmicas. Uma pesquisa de laboratório ou de campo implica, necessariamente, a pesquisa bibliográfica preliminar. Seminários, painéis, debates, resumos críticos, monográficas não dispensam a pesquisa bibliográfica. Ela é obrigatória nas pesquisas exploratórias, na delimitação do tema de um trabalho ou pesquisa, no desenvolvimento do assunto, nas citações, na apresentação das conclusões. Portanto, se é verdade que nem todos os alunos realizarão pesquisas de laboratório ou de campo, não é menos verdadeiro

que todos, sem exceção, para elaborar os diversos trabalhos solicitados, deverão empreender pesquisas bibliográficas (ANDRADE, 2010, p. 25).

A pesquisa científica se inicia com a etapa da pesquisa bibliográfica, na qual o pesquisador busca obras previamente publicadas de relevância para compreender e analisar o tema problemático da pesquisa a ser conduzida. Desta forma o processo metodológico foi meteticulosamente separado nas seguintes etapas:

Estabeleceu-se como objetivo central investigar a possibilidade de incorporação do spin do elétron na mecânica quântica, analisando seu impacto teórico nas equações de Schrödinger e Pauli.

3.1 Seleção dos Sites Acadêmicos

A seleção dos sites acadêmicos ocorreu com base em critérios específicos, considerando a reputação das fontes, sua relevância para a física quântica e a disponibilidade de informações pertinentes ao tema de pesquisa. Sites como arXiv, PubMed, Google Scholar e os livros de NUSSENZVEIG (2014), o qual discute os conceitos de ótica, relatividade e física quântica em seu livro "Curso de física básica" (vol. 4) e o livro de LEITE LLOPES (1992) o qual discorre na parte inicial sobre a equação de Pauli. Vale ressaltar que portais de universidades renomadas foram privilegiados. Os autores Aegerter (1985) e Donoso; Nascimento (1990) abordam o efeito Zeeman Normal e Anômalo. Utilizamos como uma das referências Gomes, Pietrocola para abordarmos o experimento de Stern-Gerlach, 2011.

3.2 Levantamento Bibliográfico

Utilizando termos-chave como "Spin do Elétron", "Mecânica Quântica", "Equação de Schrödinger" e "Equação de Pauli", realizou-se um extenso levantamento de artigos, teses e documentos presentes nos sites acadêmicos selecionados. De acordo com Volpato (2010), a estratégia de pesquisa consiste em um conjunto de termos ou expressões conectadas por operadores booleanos. Esses operadores informam ao sistema de busca como unir os termos da pesquisa, possibilitando ampliar ou reduzir o alcance dos resultados. Ademais, é viável utilizar sinais que representam recursos específicos disponíveis em diferentes bases de dados para aprimorar os resultados da pesquisa ou simplificar o processo.

4 Análise Crítica das Fontes

As fontes selecionadas foram submetidas a uma análise crítica, avaliando-se sua relevância, coerência, consistência e atualidade. Para Fonseca (2002), é realizada a partir do levantamento de referências teóricas já analisadas, e publicadas por meios escritos e eletrônicos, como livros, artigos científicos, páginas de web sites. Qualquer trabalho científico inicia-se com uma pesquisa bibliográfica, que permite ao pesquisador conhecer o que já se estudou sobre o assunto. Existem porém pesquisas científicas que se baseiam unicamente na pesquisa bibliográfica, procurando referências teóricas publicadas com o objetivo de recolher informações ou conhecimentos prévios sobre o problema a respeito do qual se procura a resposta (FONSECA, 2002, p. 32).

Desta forma com base nas fontes selecionadas e na análise crítica realizada, as informações obtidas foram aplicadas na investigação teórica da incorporação do spin do elétron na mecânica quântica, visando avaliar suas implicações nas equações de Schrödinger e Pauli.

5 Considerações Finais

Neste trabalho, exploramos as sutilezas da Mecânica Quântica, destacando como essa revolucionária teoria expandiu os horizontes da física para além dos limites clássicos.

Inicialmente, investigamos a equação de Schrödinger desde sua dedução com ondas estacionárias e relação ótica mecânica, focando na sua importância fundamental na descrição das propriedades ondulatórias das partículas. Esta análise ressaltou como a equação de Schrödinger descreve a evolução temporal dos estados quânticos e estabelece um elo crucial entre conceitos clássicos e quânticos.

Prosseguindo com o estudo do átomo de Hidrogênio, demonstramos como os números quânticos n , l , e m emergem naturalmente da solução da equação de Schrödinger. Estes números quânticos são fundamentais para a compreensão da estrutura atômica, descrevendo os níveis de energia, o momento angular orbital e a orientação do momento angular no espaço, respectivamente.

Com a introdução da equação de Pauli, nosso estudo ganhou uma nova dimensão. Esta equação, uma extensão da Mecânica Quântica de Schrödinger, incorpora o número quântico de spin, s , um elemento fundamental para descrever a interação entre o spin do elétron e campos magnéticos externos. Ao examinar a equação de Pauli, destacamos como o spin, representado por um novo número quântico, enriquece nossa compreensão dos sistemas quânticos, ilustrando a complexidade e a beleza da mecânica quântica em sistemas onde o spin desempenha um papel significativo.

Nas aplicações, apresentamos nossa compreensão dos fenômenos quânticos ao examinar o efeito Zeeman, tanto em suas formas normal quanto anômala. Estas seções ressaltaram a interação complexa entre elétrons e campos magnéticos. No efeito Zeeman normal, observamos uma divisão espectral clara, enquanto no efeito Zeeman anômalo, a importância do spin do elétron foi determinante, demonstrando como ele contribui significativamente para a divisão espectral e revela as sutilezas do comportamento dos elétrons.

Por fim, apresentamos a análise do experimento histórico de Stern e Gerlach que demonstrou a quantização espacial e, indiretamente, a existência do spin do elétron. O estudo detalhado deste experimento reafirmou a importância da experimentação na validação e evolução das teorias físicas.

Como perspectiva futura, propomos aprofundar nosso estudo da Mecânica Quântica com a equação de Dirac, que incorpora na teoria quântica os conceitos da relatividade especial de Einstein, fornecendo uma compreensão mais profunda do spin e das antipartículas.

Referências

- [1] AEGERTER, M.; LI, M. S.; DONOSO, J. P.; NASCIMENTO, O. R. Efeito Zeeman. Edições de 1985 e 1990. Disponível em: [<https://www.ifsc.usp.br/lavfis/images/BDApostilas/ApEfZeeman/Zee-man-1.pdf>]. Acesso em: [03/10/2023].
- [2] NUSSENZVEIG, Moyses. *Curso de Física Básica Vol. 4 Ótica, Relatividade e Física Quântica*. 2^aed. São Paulo: Editora Blucher, 2014.
- [3] ANDRADE, Maria Margarida de. *Introdução à metodologia do trabalho científico*. 2010. p. 158-158. Disponível em: <https://pesquisa.bvsalud.org/portal/resource/pt/biblio-1074307>. Acesso em 20 de ago. 2023.
- [4] COHEN-TANNOUDJI, Claude; DIU, Bernard; LALOE, Franck. *Quantum Mechanics*. Volume 1. 2^a ed. Paris: Wiley-VCH, 2005. Disponível em: <https://archive.org/details/cohen-tannoudji-diu-and-laloe-quantum-mechanics-vol.-i-ii-and-iii-2nd-ed>. Acesso em 23 de jul. 2023.
- [5] CRESSER, J. *Particle Spin and the Stern-Gerlach Experiment*. 2009. Disponível em: <http://physics.mq.edu.au/~jcresser/Phys301/Chapters/Chapter6.pdf>. Acesso em: 24 nov. 2023.
- [6] DIRAC, P. A. M. *The quantum theory of the electron*. Proc. R. Soc. Lond. A, v. 117, p. 610-624, 1928. Disponível em: <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023>. Acesso em 16 de jun. 2023.
- [7] DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. 4^a ed. Oxford: Oxford University Press, 1958. Disponível em: <https://i3d.me/ThePrinciplesofQuantumMechanics>. Acesso em 11 de jul. 2023.
- [8] FONSECA, J. J. S. *Metodologia da pesquisa científica*. Fortaleza: UEC, 2002. Apostila. Disponível em: <https://i3d.me/nAS52g>. Acesso em 12 de nov. 2023.
- [9] FRIEDRICH, B.; HERSCHBACH, D. *Space quantization: Otto stern's lucky star*. Daedalus, v. 127, n. 1, p. 165-191, 1998.

- [10] GASIOROWICZ, Stephen. *Quantum Physics*. 3^a ed. New York: Wiley, 2003. Disponível em: https://www.academia.edu/36604374/_Stephen_Gasiorowicz_Quantum_Physics_3rd_Ed. Acesso em 21 de abr. 2023.
- [11] GOMES, Gerson G.; PIETROCOLA, Maurício. *O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história*. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 33, 2011. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/rbef/a/g7F4wDfZYtBSGjB66bg9B8L/?lang=pt&format=html>. Acesso em 23 de nov. 2023.
- [12] GRIFFITHS, David J. *The adiabatic approximation*. In: Introduction to Quantum Mechanics, 2nd ed.; Pearson Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, USA, p. 371-396, 2004.
- [13] LEITE LOPES, J. *Introdução à Eletrodinâmica Quântica*. Rio de Janeiro: CBPF, 1992. Disponível em: <https://www.docsity.com/pt/introducao-a-eletrodinamica-quantica-jose-leite-lopes/4758997/>. Acesso em 25 de abr. 2023.
- [14] LUIZ, Adir Moysés. *Coleção Física 2 Gravitação. Ondas e Termodinâmica*. Editora Livraria da Física, 2007. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=nle_5Mu6sP8C&lpg=PA1&ots=1w2Fqu1WmH&dq=Adir%20Moys%C3%A9s%20Luiz&lr&hl=pt-BR&pg=PA6&output=embed. Acesso em 14 de mai. 2023.
- [15] MCMAHON, D. *Quantum Mechanics Demystified*. 2. ed. Editora: McGraw -Hill Education, 2013. Disponível em: https://scholar.google.com/scholar?hl=pt-BR&as_sdt=0%2C5&q=MCMAHON%2CD.+Quantum+Mechanics+Demystified.+2.+ed.+Editora%3A+McGraw+-Hill+Educa-tion%2C+2013.&btnG=. Acesso em 13 de mai. 2023.
- [16] PAULI, W. *Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons*. Z. Physik 43, 601-623 (1927). Disponível em: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-322-90270-2_32. Acesso em 14 de fev. 2023.
- [17] SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, Jim. *Modern Quantum Mechanics*. 2^a ed. San Francisco: Addison-Wesley, 2010. Disponível em: <https://www.fisica.net/mecanica-quantica/Sakurai%20-%20Modern%20Quantum%20Mechanics.pdf>. Acesso em 16 de nov. 2023.

- [18] SHANKAR, Ramamurti. *Principles of Quantum Mechanics*. 2^a ed. New York: Plenum Press, 1994. Disponível em: https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:26078026. Acesso em 20 de mai. 2023.
- [19] VOLPATO, E. S. N. *Estratégia de busca*. Disponível em: <http://www.biblioteca.btu.unesp.br>. Acesso em: 29 jul. 2023.