20: O Spin

Para introduzir o spin vamos apresentar um tratamento mais geral do momento angular. No tratamento anterior, tínhamos obtido que os autovalores m de $\hat{l}_z$ deviam ser números inteiros, sob o argumento de que as autofunções de $\hat{l}_z$,

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

deviam ser periódicas, de período 2π, na variável ϕ. Este argumento não é rigoroso, pois a função de onda é determinada a menos de uma fase. Retomaremos o problema agora. Descobriremos que há novas possibilidades para os valores de m e l.

Para comodidade do leitor, repetiremos aqui alguns dos resultados que obtivemos anteriormente para o momento angular.

$$\hat{l}_+\hat{l}_- = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z \tag{383}$$

$$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z \tag{384}$$

Da relação $\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$ concluímos que existe um valor máximo para o autovalor de $\hat{l}_z$. Seja l este valor máximo, e ψ_l a autofunção comum a $\hat{\vec{l}}^2$ e $\hat{l}_z$ correspondente. Temos

$$\hat{l}_+\psi_l = 0$$

Logo,

$$\hat{l}_-\hat{l}_+\psi_l = 0$$

Usando (385),

$$\left(\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z\right)\psi_l = 0$$

ou

$$\hat{\vec{l}}^2\psi_l = l(l+1)\psi_l$$

Conclui-se que o autovalor de $\hat{\vec{l}}^2$ para a autofunção ψ_l é $l(l+1)$, onde l é o máximo valor possível para m. Passaremos a denotar por ψ_{lm} as autofunções comuns a $\hat{\vec{l}}^2$ e $\hat{l}_z$. Vamos determinar agora o menor valor possível para m.

Em primeiro lugar, do fato de que $[\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_-] = 0$, segue que

$$\hat{\vec{l}}^2\left(\hat{l}_-\psi_{lm}\right) = \hat{l}_-\left(\hat{\vec{l}}^2\psi_{lm}\right) = l(l+1)\left(\hat{l}_-\psi_{lm}\right)$$

ou seja, o autovalor de $\hat{\vec{l}}^2$ é o mesmo para todos os ψ_{lm}, com l fixo.

Seja B o mínimo valor de m. Então

$$\begin{aligned}
\hat{l}_- \psi_{lB} &= 0 \\
\hat{l}_+ \hat{l}_- \psi_{lB} &= 0 \\
\left(\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z\right) \psi_{lB} = &= 0 \\
l(l+1)\psi_{lB} &= (B^2 - B)\psi_{lB} \\
l(l+1) - B^2 + B &= 0 \\
(l+B)(l-B+1) &= 0
\end{aligned}$$

Esta última tem duas soluções, $B = l+1$, que é impossível, pois o máximo valor de m é l, e $B = -l$, que é o valor correto. Então, m está no intervalo $-l \leq m \leq l$, e seus valores sucessivos diferem de uma unidade: há, portanto, $2l+1$ valores de m, para l dado. Em consequência, $2l+1$ deve ser um número inteiro, e temos duas possibilidades: (a) l é inteiro, que é o caso que já havíamos estudado. Costuma-se chamar esses momento s angulares de *momento angular orbital*. (b) l é um ímpar dividido por dois (*semi-inteiro*, na gíria dos físicos). Este tipo de momento angular é denominado *spin*. Temos, então, spins $l = 1/2$, $l = 3/2$, etc.

Na verdade essa nomenclatura não é a usada na prática, embora seja a preferível, do ponto de vista da matemática. Chama-se spin de um sistema o momento angular desse sistema quando em repouso. Um elétron em repouso tem momento angular tal que $l = 1/2$, um *pion* em repouso tem momento angular tal que $l = 0$, e há mesons, ditos vetoriais, com momento angular em repouso tal que $l=1$. É costume, por abuso de linguagem, dizer que essas partículas têm spin $1/2$, spin 0, spin 1, etc.

Elementos de matriz

O caso mais importante do spin é aquele em que $l=1/2$. Neste caso, m só pode ter os valores $+1/2$ e $-1/2$, e é conveniente tratar os operadores de momento angular utilizando suas representações matriciais. Para tanto, vamos determinar os elementos de matriz dos operadores $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ e $\hat{l}_z$. Temos, usando a notação de Dirac,

$$\langle lm|\hat{\vec{l}}^{\,2}|lm\rangle = l(l+1) \tag{385}$$

e, como

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} = \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z \ ,$$

$$\langle lm|\hat{\vec{l}}^{\,2}|lm\rangle = \langle lm|\hat{l}_+\hat{l}_-|lm\rangle + \langle lm|\hat{l}_z^2|lm\rangle - \langle lm|\hat{l}_z|lm\rangle$$

Como todos esses elementos de matriz contêm o mesmo valor de l, podemos omitir este índice, ou seja, podemos abreviar a notação para:

$$\langle m|\hat{l}_z|m\rangle \equiv \langle lm|\hat{l}_z|lm\rangle$$

etc.

Obviamente $\langle m|\hat{l}_z|m\rangle = m$, $\langle m|\hat{l}_z^2|m\rangle = m^2$ e $\langle m|\hat{\vec{l}}^{\,2}|m\rangle = l(l+1)$. Logo,

$$\langle m|\hat{l}_+\hat{l}_-|m\rangle = l(l+1) - m^2 + m \tag{386}$$

ou

$$\langle m|\hat{l}_+\hat{l}_-|m\rangle = (l+m)(l-m+1) \tag{387}$$

A completude dos autoestados de $\hat{l}_z$ permite escrever

$$\sum_{m'} |m'\rangle\langle m'| = \hat{1}$$

que, inserida em (388), dá

$$\sum_{m'} \langle m|\hat{l}_+|m'\rangle\langle m'|\hat{l}_-|m\rangle = (l+m)(l-m+1) \tag{388}$$

e sabemos que $\langle m|\hat{l}_+|m'\rangle$ só é diferente de zero se m' for igual a $m-1$. Logo, (389) se escreve

$$\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle\langle m-1|\hat{l}_-|m\rangle = (l+m)(l-m+1) \tag{389}$$

Além disso, $\hat{l}_-^+ = \hat{l}_+$ e

$$\langle m-1|\hat{l}_-|m\rangle = \left(\langle m|\hat{l}_-^+|m-1\rangle\right)^* = \left(\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle\right)^* ,$$

o que permite escrever, de (390),

$$|\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle|^2 = (l+m)(l-m+1) \; . \tag{390}$$

Daí tiramos que

$$\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle = e^{i\alpha}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \; . \tag{391}$$

A escolha de α está ligada à definição precisa dos harmônicos esféricos $Y_{lm}(\theta,\phi)$. Para a escolha feita anteriormente, Eq.(329), deve-se escolher $\alpha=0$. Logo,

$$\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{392}$$

e, como $\langle m-1|\hat{l}_-|m\rangle = (\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle)^*$, temos

$$\langle m-1|\hat{l}_-|m\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\ . \tag{393}$$

Estes são os únicos elementos de matriz não-nulos, de $\hat{l}_+$ e $\hat{l}_-$. A partir deles, podemos construir os elementos de matriz de $\hat{l}_x$ e $\hat{l}_y$, pois

$$\hat{l}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{l}_+ + \hat{l}_-\right) \tag{394}$$

$$\hat{l}_y = \frac{1}{2i}\left(\hat{l}_+ - \hat{l}_-\right) \tag{395}$$

De fato,

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{l}_x|m-1\rangle &= \frac{1}{2}\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle + \frac{1}{2}\langle m|\hat{l}_-|m-1\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle m|\hat{l}_+|m-1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\end{aligned} \tag{396}$$

$$\langle m|\hat{l}_x|m-1\rangle = \langle m|\hat{l}_x|m-1\rangle^* = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{397}$$

Assim, os elementos de matriz de $\hat{l}_x$ que não são nulos são

$$\langle m|\hat{l}_x|m-1\rangle = \langle m-1|\hat{l}_x|m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{398}$$

Por um cálculo análogo obtêm-se os elementos de matriz não-nulos de $\hat{l}_y$:

$$\langle m|\hat{l}_y|m-1\rangle = -\langle m-1|\hat{l}_y|m\rangle = -\frac{i}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{399}$$

Usando as expressões obtidas para os elementos de matriz, vamos construir as matrizes que representam os operadores $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ e $\hat{l}_z$. Para este último, temos que os elementos de matriz não-nulos são:

$$\langle 1/2|\hat{l}_z|1/2\rangle = \frac{1}{2} \tag{400}$$

$$\langle -1/2|\hat{l}_z|-1/2\rangle = -\frac{1}{2} \tag{401}$$

Os valores possíveis de m sendo +1/2 e -1/2, as matrizes terão a forma genérica:

$$\begin{pmatrix} a_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} & a_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \\ a_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} & a_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \tag{402}$$

onde $a_{i,j} = \langle i|a|j\rangle$. Para $\hat{l}_z$, portanto,

$$\hat{l}_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{403}$$

onde introduzimos a matriz

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{404}$$

que é uma das *matrizes de Pauli*, que serão muito utilizadas no que segue.

Verifica-se facilmente que

$$\hat{l}_y = \begin{pmatrix} \langle 1/2|l_y|1/2\rangle & \langle 1/2|l_y|-1/2\rangle \\ \langle -1/2|l_y|1/2\rangle & \langle -1/2|l_y|-1/2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{405}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{406}$$

$$= \frac{1}{2}\sigma_y \tag{407}$$

onde introduzimos a matriz de Pauli σ_y,

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{408}$$

Por um cálculo análogo chega-se a

$$\hat{l}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{409}$$

Temos, portanto,

$$\hat{l}_i = \frac{1}{2}\sigma_i \tag{410}$$

para $i = 1, 2, 3$, sendo $(1, 2, 3) = (x, y, z)$, como de costume. As matrizes de Pauli são

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{411}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{412}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{413}$$

Representações matriciais de operadores são sempre *em relação a uma base*. Qual é a base usada nas representações matriciais acima? Para descobri-la, basta notar que a matriz que representa $\hat{l}_z$ é diagonal. Logo, a base é a dos autoestados de $\hat{l}_z$. Explicitamente, temos

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{414}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{415}$$

Desta relação vemos que os autoestados de $\hat{l}_z$ são representados pelas matrizes coluna $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, que formam uma base das matrizes coluna $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, com a e b arbitrários. Resta especificar o produto escalar de dois estados quaisquer, em termos de suas representações matriciais. Verifica-se facilmente que o produto escalar de $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ por $\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ é dado por

$$(a^*, b^*)\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = a^*c + b^*d \qquad (416)$$

De fato, em termos deste produto escalar, os elementos da base, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ são ortonormais, o que prova a questão.

As matrizes de Pauli

As matrizes

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (417)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (418)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (419)$$

têm propriedades especiais que facilitam o cálculo das propriedades dos estados de spin 1/2.

P1: $Tr(\sigma_x) = Tr(\sigma_y) = Tr(\sigma_z) = 0$. (Imediata).

P2: $\sigma_x\ ,\ \sigma_y\ ,\ \sigma_z$ são hermiteanas. (Imediata)

P3: $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \vec{1}$, onde

$$\vec{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

P4: $\sigma_a\sigma_b = \delta_{ab}\vec{1} + i\epsilon_{abc}\sigma_c$, cuja demonstração é um exercício simples. Esta propriedade sintetiza a P3 e as seguintes relações:

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z \tag{420}$$
$$\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y \tag{421}$$
$$\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x \tag{422}$$
$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x \tag{423}$$

e assim por diante.
É conveniente introduzir a notação

$$\vec{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

que descreve as σ_i como componentes de um "vetor" denotado por $\vec{\sigma}$. Usando esta convenção se escreve, por exemplo, se $\vec{a}$ for um vetor ordinário,

$$\vec{\sigma}.\vec{a} = a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a + z\sigma_z$$

ou seja, $\vec{\sigma}.\vec{a}$ é uma matriz 2x2. Podemos então enunciar a

P5: $(\vec{\sigma}.\vec{a})(\vec{\sigma}.\vec{b}) = \vec{a}.\vec{b} + i\vec{\sigma}.(\vec{a}\times\vec{b})$, onde o termo entre parênteses é o produto vetorial ordinário. Demonstração:

$$\sigma_l a_l \sigma_m b_m = a_l b_m \sigma_l \sigma_m = a_l b_m (\delta_{lm} + i\epsilon_{lmn}\sigma_n)$$

$$= \vec{a}.\vec{b} + i\sigma_n\epsilon_{nlm}a_l b_m = \vec{a}.\vec{b} + i\vec{\sigma}.(\vec{a}\times\vec{b})$$

Teorema: Seja A uma matriz 2x2 complexa qualquer. Então existem números λ_0, λ_x, λ_y e λ_z tais que

$$A = \lambda_0\vec{1} + \lambda_x\sigma_x + \lambda_y\sigma_y + \lambda_z\sigma_z \tag{424}$$

Estes números são únicos. Ou seja, $\vec{1}$, σ_x, σ_y e σ_z são uma base do espaço vetorial das matrizes 2x2 complexas. A demonstração consiste em exibir esses números. Suponhamos o problema resolvido, isto é:

$$A = \lambda_0 \vec{1} + \lambda_x \sigma_x + \lambda_y \sigma_y + \lambda_z \sigma_z \tag{425}$$

Tomando o traço termo a termo, temos:

$$Tr(A) = \lambda_0 Tr(\vec{1}) + \lambda_x Tr(\sigma_x) + \lambda_y Tr(\sigma_y) + \lambda_z Tr(\sigma_z) \tag{426}$$

onde usamos $Tr(\lambda A) = \lambda Tr(A)$, para qualquer número λ e qualquer matriz A, temos, levando em conta a P1,

$$Tr(A) = \lambda_0 Tr(\vec{1}) = 2\lambda_0 \tag{427}$$

ou

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} Tr(A) \tag{428}$$

Para calcular λ_x procedemos assim: multiplicamos (426) termo a termo, à esquerda, por σ_x, obtendo:

$$\sigma_x A = \lambda_0 \sigma_x + \lambda_x \vec{1} + \lambda_y \sigma_x \sigma_y + \lambda_z \sigma_x \sigma_z \tag{429}$$

Ora, os produtos $\sigma_i \sigma_j$ com $i \neq j$, são matrizes de traço nulo. Logo, tomando, termo a termo, o traço de (430), temos

$$Tr(\sigma_x A) = \lambda_x Tr(\vec{1}) = 2\lambda_x \tag{430}$$

Ou,

$$\lambda_x = \frac{1}{2} Tr(\sigma_x A) \tag{431}$$

e, procedendo analogamente,

$$\lambda_i = \frac{1}{2} Tr \sigma_i A) \tag{432}$$

Demonstra-se facilmente, usando este método, que $\vec{1}$ e as três matrizes de Pauli são linearmente independentes. Além disso, o espaço vetorial das matrizes 2x2 complexas tem dimensão 4. Logo, o conjunto considerado é uma base, e portanto os coeficientes calculados acima são únicos.

Interação Eletromagnética: Formalismo Hamiltoniano

O problema que estudaremos aqui é o seguinte: uma partícula de massa m e carga q está sob ação de um campo eletromagnético descrito por $\vec{E}$ e $\vec{B}$. Determinar o Hamiltoniano da partícula.

Não fosse pelo campo eletromagnético, o Hamiltoniano seria o de uma partícula livre,

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \,.$$

A força que age sobre uma partícula de carga q, devida aos campos elétrico e magnético, é (força de Lorentz):

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$$

Em termos dos potenciais, temos,

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} &= rot \vec{A} \end{aligned}$$

Logo,

$$\vec{F} = q\{-\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}[\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{v} \times rot\, \vec{A}]\}$$

Como é bem sabido,[22]

$$\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + (\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{A}\ .$$

Como $\vec{v} \times rot\,\vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{v}.\vec{A}) - (\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{A}$, temos

$$\begin{aligned}\vec{F} &= q\{-\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}[\frac{d\vec{A}}{dt} - (\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{A} - \vec{\nabla}(\vec{v}.\vec{A}) + (\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{A}]\} \\ &= q\{-\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}[\frac{d\vec{A}}{dt} - \vec{\nabla}(\vec{v}.\vec{A})]\}\end{aligned} \tag{433}$$

ou seja,

$$\vec{F} = q[-\vec{\nabla}(\phi - \frac{1}{c}\vec{v}.\vec{A}) - \frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}]\ . \tag{434}$$

Seja $U = q(\phi - \frac{1}{c}\vec{v}.\vec{A})$. Vamos mostrar que a lagrangeana

$$L = T - U = T - q\phi + \frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A} \tag{435}$$

descreve o movimento de uma partícula sob a ação da força $\vec{F}$. Aqui, como de costume, T representa a energia cinética. De fato,

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -q\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \equiv \frac{\partial L}{\partial v_x} = \frac{\partial T}{\partial v_x} + \frac{q}{c}A_x$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial v_x} = \frac{d}{dt}(\frac{\partial T}{\partial v_x}) + \frac{q}{c}\frac{dA_x}{dt}$$

Logo, a equação de Lagrange, $\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial v_x} = 0$, dá

$$-q\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A}) = \frac{d}{dt}(\frac{\partial T}{\partial v_x}) + \frac{q}{c}\frac{dA_x}{dt}$$

de modo que

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial T}{\partial v_x}) = q\{-\vec{\nabla}(\phi - \frac{1}{c}\vec{v}.\vec{A}) - \frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}\}_x$$

Mas

$$\frac{\partial T}{\partial v_x} = \frac{\partial}{\partial v_x}(\frac{1}{2}m\vec{v}^2) = mv_x$$

de maneira que

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial T}{\partial v_x}) = (m\dot{\vec{v}})_x \ .$$

Logo,

$$m\dot{\vec{v}} = q\{-\vec{\nabla}(\phi - \frac{1}{c}\vec{v}.\vec{A}) - \frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}\} \tag{436}$$

Conclusão: $L = T - q\phi + \frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A}$. Passemos agora à construção do hamiltoniano.

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(\vec{v}.\vec{A})$$

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(\vec{v}.\vec{A}) = A_i$$

e, então,

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c}A_i$$

Precisamos agora de uma propriedade importante das funções homogêneas, o teorema de Euler (ver Apêndice):

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T$$

Vamos usá-lo para calcular o Hamiltoniano H:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \dot{q}_i\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c}A_i\right) - T + q\phi - \frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A} \\ &= \underline{2T + \frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A} - T + q\phi - \frac{q}{c}\vec{v}.\vec{A}} \end{aligned} \tag{437}$$

ou seja,

$$H = T + q\phi \tag{438}$$

Ora, $p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c}\vec{A}_i = m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}$, pois $T = \frac{m\vec{v}^2}{2}$. Logo,

$$m\vec{v} = \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$$

e, finalmente,

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 + q\phi \tag{439}$$

Em palavras, no Hamiltoniano livre

$$H = \frac{1}{2m}\vec{p}^2$$

substituo $\vec{p}$ por $\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$, e adiciono $q\phi$. Esta é a chamada *substituição mínima*, ou *acoplamento mínimo*. Se o hamiltoniano for mais geral, do tipo

$$H = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r})$$

onde $V(\vec{r})$ é a energia potencial, a mesma regra vale. Adicione-se $q\Phi$ e substitua-se $\vec{p}$ por $\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$. Se houver várias partículas, de momento s $\vec{p}_i$, faça-se a mesma substituição para cada $\vec{p}_i$, adicionando-se termos de energia potencial $q_i\phi$ para cada partícula. Essas generalizações são fáceis de demonstrar, seguindo exatamente o padrão do caso de uma partícula livre.

Apêndice: O teorema de Euler

Uma função $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ é dita homogênea de grau k se

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \ldots, \lambda x_n) = \lambda^k f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \tag{440}$$

Por exemplo, $f(x,y) = xy$ é homogênea de grau 2; $f(x,y,z) = x^2y + 3z^2x + 5xyz$ é homogênea de grau 3.

O teorema de Euler diz que, se f é uma função homogênea de grau k, então

$$\sum_i x_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = kf \qquad (441)$$

A demonstração é muito simples. Derive a Eq. 441 em relação a λ, e depois tome $\lambda = 1$.

Acoplamento do spin com o campo magnético

Seja

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (442)$$

o hamiltoniano de uma partícula de spin 1/2 e carga e. Note-se que

$$(\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{p}) = \vec{p}.\vec{p} + i\vec{\sigma}.(\vec{p} \times \vec{p}) = \vec{p}.\vec{p} \qquad (443)$$

de maneira que o hamiltoniano acima pode também ser escrito

$$\hat{H} = \frac{(\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{p})}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (444)$$

O acoplamento mínimo, estudado no parágrafo anterior, consiste na substituição de $\vec{p}$ por $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, onde $\vec{A}$ é o potencial vetor do campo eletromagnético que age sobre a pertícula. Ora, se se realiza essa substituição em (443) ou em (445), obtêm-se resultados diferentes. Verifica-se que os resultados corretos são obtidos usando-se o hamiltoniano em (445). Fica claro neste ponto, então, que o acoplamento do spin com o campo eletromagnético que vamos introduzir tem um caráter empírico. É só quando se utiliza a equação de Dirac para descrever o spin do elétron que se obtém, diretamente da teoria e sem a necessidade de fazer escolhas, um acoplamento definido (que corresponde àquele que, aqui, foi escolhido por razões empíricas).

Devemos, então, descrever as interações eletromagnéticas da partícula usando o hamiltoniano

$$\hat{H}_{em} = \frac{1}{2m}\left\{\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\right\} + V(\vec{r}) + e\phi \tag{445}$$

Como estamos interessados no campo magnético, vamos ignorar o último termo. Consideremos o termo $\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right].\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]$. Temos

$$\begin{aligned}
& \left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right].\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right] = \\
= \quad & (\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{p}) - \frac{e}{c}(\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{A}) - \frac{e}{c}(\vec{\sigma}.\vec{A})(\vec{\sigma}.\vec{p}) + \\
+ \quad & \frac{e^2}{c^2}(\vec{\sigma}.\vec{A})(\vec{\sigma}.\vec{A}) = \\
= \quad & \vec{p}^2 - \frac{e}{c}\left(\vec{p}.\vec{A} + i\vec{\sigma}.(\vec{p}\times\vec{A})\right) - \frac{e}{c}\left((\vec{A}.\vec{p}) + i\vec{\sigma}.(\vec{A}\times\vec{p})\right) + \\
+ \quad & \frac{e^2}{c^2}\vec{A}.\vec{A}
\end{aligned} \tag{446}$$

Mas,

$$\begin{aligned}
\left[(\vec{p}.\vec{A}) + (\vec{A}.\vec{p})\right]\psi \quad & = \quad -i\hbar\vec{\nabla}.(\vec{A}\psi) - i\hbar\vec{A}.\vec{\nabla}\psi \\
& = \quad -i\hbar(\vec{\nabla}.\vec{A})\psi - i\hbar\vec{A}.\vec{\nabla}\psi - i\hbar\vec{A}.\vec{\nabla}\psi
\end{aligned} \tag{447}$$

Escolhendo o gauge em que $\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$, temos

$$\left[(\vec{p}.\vec{A}) + (\vec{A}.\vec{p})\right]\psi = -2i\hbar\vec{A}.\vec{\nabla}\psi \tag{448}$$

ou,

$$\left[(\vec{p}.\vec{A}) + (\vec{A}.\vec{p})\right] = 2\vec{A}.\vec{p} \qquad (449)$$

Temos ainda

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}.\left[\vec{p}\times\vec{A} + \vec{A}\times\vec{p}\right. &= \\
&= \vec{\sigma}.\left[-i\hbar\vec{\nabla}\times(\vec{A}\psi) + \vec{A}\times(-i\hbar\vec{\nabla}\right. \\
&= \vec{\sigma}.\left[-i\hbar\left((rot\vec{A})\psi - \vec{A}\times\vec{\nabla}\psi\right) -\right. \\
&= -i\hbar\vec{\sigma}.\left[\vec{B}\psi\right] \\
&= -i\hbar\vec{\sigma}.\vec{B}\psi
\end{aligned} \qquad (450)$$

Reunindo tudo, temos

$$\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right] = \vec{p}^2 - 2\frac{e}{c}\vec{A}.\vec{p} - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}.\vec{B} + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2 \qquad (451)$$

O hamiltoniano $\hat{H}_{em}$ é obtido dividindo isso por $2m$:

$$\hat{H}_{em} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc}\vec{A}.\vec{p} - \frac{\hbar e}{2mc}\vec{\sigma}.\vec{B} \qquad (452)$$

Para o caso de um campo uniforme, temos

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B}\times\vec{r}) \qquad (453)$$

como o leitor verificará facilmente. Resulta então que

$$\hat{H}_{em} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\vec{B}.(\vec{r}\times\vec{p}) - \frac{\hbar e}{2mc}\vec{\sigma}.\vec{B} \qquad (454)$$

Finalmente, usando $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ e $\vec{s} = \hbar\frac{\vec{\sigma}}{2}$, temos

$$\hat{H}_{em} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\vec{L}.\vec{B} - \frac{e}{mc}\vec{s}.\vec{B} \qquad (455)$$

Há ainda, é claro, o termo $\frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2$, que omitimos porque, no tratamento perturbativo, representa uma correção de ordem superior às que usualmente se calcula.