

## 10 El espín

Ya hemos introducido al comienzo el experimento de Stern y Gerlach a partir del cual se postula que el electrón tiene un momento angular intrínseco llamado espín. El átomo del haz de Plata que participa en el experimento tiene un sólo electrón de valencia y entonces el momento angular del átomo corresponde al de dicho electrón porque los demás cancelan las contribuciones entre si. Cuando es colocado en un campo magnético que aproximadamente puede considerarse a lo largo del eje  $Z$  y que varía fuertemente en esa dirección (en realidad  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  y así  $\partial_z B_z = -\partial_x B_x - \partial_y B_y$ ) y el Hamiltoniano cuántico se obtendría despreciando el tamaño del átomo y **suponiendo en principio que el origen del momento angular es orbital**

$$\hat{H}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e c} - \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B}(\hat{z}), \quad \hat{\mathbf{m}} = \frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{L}} \equiv \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{L}},$$

donde  $\mu_B$  se denomina magneton de Bohr. Según antes vimos aparece una aceleración  $\hat{\mathbf{a}} = -\frac{1}{m_e} \nabla U$  (trabajemos en coordenadas esféricas) producida por el campo sobre el átomo será

$$\hat{a}_z = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{-\partial}{\partial z} \left( B(z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{\partial B(z)}{\partial z} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \sim \hat{L}_z.$$

Dado que  $[\hat{H}_e, \hat{L}^2; \hat{L}_z] = 0$  estos tres podrían formar un COCOOCO y tener autoestados  $|nlm\rangle$  donde  $l = -m, \dots, m$  que son  $2l + 1$  valores. Por lo tanto cuando los átomos impactan sobre la pantalla de condensación deberían formar  $2l + 1$  manchas, número impar para cualquier  $l$  que tenga el electrón más externo del átomo, pero **sólo se ven dos**. Esto se vió más claro en el experimento de Phipps y Taylor en 1927 donde usaron átomos de Hidrógeno que en su estado fundamental están con  $l = 0$  y entonces se debería ver una sola mancha en una pantalla pero aparecen 2.

Nos vemos obligados a proponer que el electrón tiene un momento angular intrínseco  $\hat{\mathbf{s}}$  que tiene las propiedades de un momento angular con  $s = \frac{1}{2}$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar$  de manera que ahora el momento magnético es

$$\hat{\mathbf{m}}_s = g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{s}}.$$

En este caso como el momento angular intrínseco no es de origen orbital no tenemos que tener la misma constante de proporcionalidad. Experimentalmente se comprueba que  $g = 2$  con errores del milésimo. En teoría de campos relativista se puede también obtener un valor teórico del mismo orden de precisión.

Así tendremos las relaciones de conmutación

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{s}_k, \quad (213)$$

y los autovalores y autovectores serán

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 |sm_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |sm_s\rangle, \\ \hat{s}_z |sm_s\rangle &= m_s \hbar |sm_s\rangle. \end{aligned}$$

Ahora si pensamos que el protón gira alrededor del electrón en su sistema de reposo, éste genera un campo magnético como lo hace una corriente en una espira, el momento magnético intrínseco deberá acoplarse a ese campo. Si suponemos que protón gira con una velocidad  $-\mathbf{v}$  y que genera una corriente  $\mathbf{j} = -e\frac{\mathbf{v}}{c}$  entonces tendremos un campo en la posición  $\mathbf{r}$  del electrón según la ley de Ampere

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{e}{m_e c r^3} \mathbf{L}$$



y así tendremos una interacción entre los momentos angulares orbital e intrínseco con un término de interacción

$$\hat{H}_{int} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{s}} \cdot \frac{e}{m_e c r^3} \hat{\mathbf{L}},$$

y se ve claramente que dada la no conmutación entre  $\hat{L}_i$  diferentes entonces

$$[\hat{H}_{int}, \hat{\mathbf{L}}] \neq 0,$$

con lo cual **si solamente el orbital sigue siendo el generador de las rotaciones, entonces nuestro hamiltoniano total ya no es invariante frente a rotaciones.** Sin embargo si quien genera las rotaciones es el *momento angular total*

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}},$$

como ahora

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2}{2},$$

donde  $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$  pues son grados de libertad que pertenecen a distintos espacios, vemos que

$$[\hat{H}_{int}, \hat{\mathbf{J}}^2; \hat{J}_z; \hat{\mathbf{L}}^2; \hat{\mathbf{s}}^2] = 0.$$

El momento angular total tendrá relaciones de conmutación

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k,$$

y sus autovalores y autovectores serán

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |jm_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |jm_j\rangle \\ \hat{J}_z |jm_j\rangle &= m_j\hbar |jm_j\rangle, -j \leq m_j \leq j.\end{aligned}$$

Ya veremos que valores posibles pueden tomar los  $j$ .

### Observación:

Ahora discutamos un poco más el carácter no clásico o del espín. Consideremos una partícula compuesta, digamos por ejemplo un núcleo atómico, que efectúa un cierto movimiento. Supondremos que la energía interna del núcleo posee un valor determinado. Sin embargo, con esto el estado interno del núcleo no queda aún, en general, determinado por completo; así, el momento cinético « interno » del núcleo,  $\hat{\mathbf{L}}$  (es decir, el momento cinético de las partículas en su movimiento dentro del núcleo), puede todavía estar orientado de diferentes maneras en el espacio ( $\hat{L}_z$ ). El número de posibles orientaciones distintas de este momento cinético es igual, como ya sabemos, a  $2l+1$ . De esta manera, al considerar el movimiento del núcleo (que se encuentra en un estado interno dado) como un todo, debemos considerar, junto a sus coordenadas, una variable discreta: la proyección de su momento cinético interno sobre una dirección, cualquiera, en el espacio. Vemos, por lo tanto, que el formalismo de la mecánica cuántica, al considerar el movimiento de una partícula arbitraria, permite introducir junto a sus coordenadas una cierta variable específica para cada partícula dada que puede tomar un número limitado de valores discretos. Si determinamos dicho valor el estado del núcleo está definido en forma completa. No tenemos, en principio, ningún derecho a suponer que dicha variable no existe cuando la partícula es elemental. En otras palabras, debemos admitir, en general, que en la mecánica cuántica hay que atribuir a una partícula elemental un cierto momento cinético intrínseco, no ligado a su movimiento en el espacio. Esta propiedad de las partículas elementales es específicamente cuántica. Pues  $s$  es un número dado para cada especie de partículas (electrón, fotón, mesón  $W$ ), al pasar al límite de la mecánica clásica  $s(s+1)\hbar \rightarrow 0$  el momento cinético de spin, se anula. Este razonamiento carece de sentido en el caso del momento cinético orbital, ya que  $l$  puede tomar valores cualesquiera. El paso a la mecánica clásica se consigue mediante la tendencia simultánea de  $\hbar \rightarrow 0$  cero y de  $l \rightarrow \infty$  (números cuánticos grandes), de forma que el producto  $\hbar l(l+1)$  se conserve finito. Así el espín y no admite una interpretación clásica. En particular, carecería por completo de sentido el representarnos el momento cinético intrínseco de una partícula elemental como resultado de su rotación en torno de su eje.

En los capítulos precedentes hemos supuesto siempre que las tres coordenadas constituyen un sistema completo de magnitudes para una partícula, dadas las cuales queda totalmente determinado el estado de la misma. Vemos ahora que, en general, no es así: para determinar por completo el estado de una partícula deben darse, no sólo sus coordenadas, sino también la dirección del vector espín. Por ello, también la función de onda de una partícula debe ser función de cuatro variables - las tres coordenadas y la variable de espín, que indica el valor de la proyección del espín sobre la dirección elegida en el espacio, y que toma un número limitado de valores discretos. Estos valores se pueden atribuir a la función de onda en forma de índice. De esta manera la función de onda de una partícula que tiene espín no nulo, es, en realidad, no una, sino el conjunto formado por un cierto número de funciones de las coordenadas distintas, funciones que difieren por su índice de espín.

## 10.1 Momento angular total

Analicemos ahora como cambia la función de onda de una partícula con espín  $s = 1/2$ ,  $m_s = \pm 1/2$  respecto a caso sin espín. Ahora además de la posición  $\mathbf{r}$ , debemos indicar  $m_s$ . Por esta razón vamos a construir los estados de una partícula mediante el producto tensorial

$$|\mathbf{r}\rangle \otimes |sm_s\rangle \equiv |\mathbf{r}m_s\rangle$$

pues se supone que  $s = 1/2$  y no se indica.

Así según lo visto para producto tensorial antes, los operadores de cada espacio pueden extenderse al espacio producto multiplicándolos por la identidad en el otro

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}m_s\rangle &\equiv \hat{\mathbf{r}}\hat{I}_s|\mathbf{r}m_s\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}m_s\rangle \\ \hat{\mathbf{s}}^2|\mathbf{r}m_s\rangle &\equiv \hat{I}_r\hat{\mathbf{s}}^2|\mathbf{r}m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2|\mathbf{r}m_s\rangle \\ \hat{s}_z|\mathbf{r}m_s\rangle &\equiv \hat{I}_r\hat{s}_z|\mathbf{r}m_s\rangle = m_s\hbar|\mathbf{r}m_s\rangle.\end{aligned}$$

Las relaciones de ortogonalidad y completitud son

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}'m'_s | \mathbf{r}m_s \rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\delta_{m_s m'_s} \\ \sum_{m_s=\pm 1/2} \int d^3r |\mathbf{r}m_s\rangle \langle \mathbf{r}m_s| &= \hat{I},\end{aligned}$$

donde esta última puede ser usada para hallar la función de onda para un estado cualquiera

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_{m_s=\pm 1/2} \int d^3r |\mathbf{r}m_s\rangle \langle \mathbf{r}m_s| \psi \\ \psi_{m_s}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}m_s | \psi \rangle,\end{aligned}$$

y dado que la representación matricial en el espacio de espín es  $|m_s = 1/2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  y  $|m_s = -1/2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  podemos definir a **un espinor**

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{1/2}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y podemos mantener la representación matricial en el espacio de espín para los operadores también

$$\begin{aligned}\hat{s}_z &= \frac{\hbar}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \hat{s}^2 &= \hbar^2 \underbrace{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}_{3/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

en resumen podemos usar **diferentes expresiones para la función de onda**  $\psi(\mathbf{r}, m_s), \psi(\mathbf{r})_{m_s}$  o los espinores descriptos arriba  $\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ .

Queremos ver como se transforma ahora un espinor frente a rotaciones. Debemos considerar que frente a una

rotación cambia el argumento  $\mathbf{r}$  del mismo y también el espinor mismo como ya hemos visto actuando un operador  $\hat{D}(R)$  cuya representación matricial es  $D^{1/2}(R)$ , donde  $\mathbf{r}' = R\mathbf{r}$ . Así

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{r}'_0) &= D^{1/2}(R)\psi(\mathbf{r}_0) \\ \psi'(R\mathbf{r}_0 \equiv \mathbf{r}) &= D^{1/2}(R)\psi(\mathbf{r}_0) \\ \psi'(\mathbf{r}) &= D^{1/2}(R)\psi(R^{-1}\mathbf{r})\end{aligned}$$

donde vemos que aparece un mismo vector  $\mathbf{r}$  al comienzo y al final. Si ahora hacemos una rotación infinitesimal de ángulo  $\epsilon$  ( $\text{sen}\epsilon \approx 0$ ,  $\text{cose}\epsilon \approx 1$ ) alrededor del eje Z sabemos que

$$\begin{aligned}D^{1/2}(R) &\approx \hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{s}_z \\ R &\approx I - \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ R^{-1} = R(-\epsilon) &\approx I + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ R^{-1}\mathbf{r} &\approx \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ y - \epsilon x \\ z \end{pmatrix}\end{aligned}$$

y así por lo tanto

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{r}) &= \left(\hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{s}_z\right)\psi(x + \epsilon y, y - \epsilon x, z) \\ &\approx \left(\hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{s}_z\right)\left(\psi(\mathbf{r}) + \epsilon y\frac{\partial\psi}{\partial x} - \epsilon x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = \left(\hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{s}_z\right)\left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{L}_z\right)\psi(\mathbf{r}) \\ &\approx \left(\hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}(\hat{s}_z + \hat{L}_z)\right)\psi(\mathbf{r}) = \left(\hat{I} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{J}_z\right)\psi(\mathbf{r}),\end{aligned}$$

por lo tanto corroboramos que  $\hat{J}_z = \hat{s}_z + \hat{L}_z$  es el generador de rotaciones infinitesimales alrededor del eje Z, donde el momento angular orbital  $\hat{L}_z$  actúa sobre la parte de coordenadas y  $\hat{s}_z$  sobre la parte de espín.

Podemos demostrar que  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}}$  generan una rotación infinitesimal finita alrededor de cualquier eje como

$$\psi'(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{J}}\phi}\psi(\mathbf{r}).$$

Dadas las relaciones de conmutación que cumplen  $\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{s}}$  o directamente del hecho de que es un generador se pueden obtener las relaciones de conmutación de  $\hat{\mathbf{J}}$ .

**Ejemplo:**

Ya hemos analizado antes en movimiento de un electrón con espín en un campo magnético constante. Simplemente ahora lo que hacemos es reescribir el problema en el lenguaje de espinores y repetir los resultados. La ecuación de Schrödinger a resolver será

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B} = (0, 0, B)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m_e} & 0 \\ 0 & \frac{\hat{p}^2}{2m_e} \end{pmatrix} + g\mu_B \overbrace{\frac{\sigma_3}{2}}^{s_z/\hbar} = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \frac{g\mu_B B}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{g\mu_B B}{2} \end{pmatrix},$$

y siguiendo el mismo procedimiento que seguimos antes se obtendrán dos soluciones independientes del tiempo

$$\phi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \phi(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}},$$

con energías

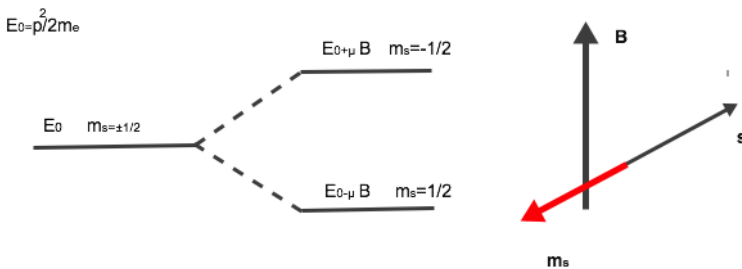
$$E_+ = \frac{p^2}{2m_e} + \mu_B B, \quad E_- = \frac{p^2}{2m_e} - \mu_B B$$

respectivamente ( $g = 2$ ). Donde vemos que como  $\hat{\mathbf{m}}_s = -g\mu_B \hat{s}_z/\hbar$  tiende a alinearse con el campo para tener menor energía, por el signo menos esto corresponde al espín para abajo.

Este desdoblamiento de energía rompiendo la degeneración en  $m_s$ , porque el término cinético no depende del espín, se llama efecto Zeeman. Obviamente la solución dependiente del tiempo será

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \chi_{\pm 1/2} e^{-i\frac{E_{\pm}}{\hbar}t},$$

y esquemáticamente



## 10.2 Acoplamiento espín-órbita

Volvamos con más detalle sobre este efecto. Tenemos al electrón moviéndose en un campo eléctrico y como genera a su vez un potencial vector (recordemos electromagnetismo II en el régimen no relativista)

$$\mathbf{A} = -\frac{e}{mc} \frac{\mathbf{p}}{r}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{e}{mcr^3} \mathbf{p} \times \hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{mc} \mathbf{p} \times \mathbf{E},$$

y ese campo interactúa con el momento magnético generado por el espín del electrón tendremos

$$V_{int} = -\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{B} = -\frac{g\mu_B}{m\hbar} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E}),$$

y si escribimos al campo eléctrico en forma más general

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -e \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d\phi}{dr} \\ V_{int} &= \frac{-ge\mu_B}{\hbar mc} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{r}) \\ &= \frac{4}{\hbar} w(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{s}, \quad w(r) = \frac{-ge\mu_B}{\hbar mc} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr}. \end{aligned}$$

Cuando se hace el cálculo relativista aparece un factor 1/2 adicional dando un  $2/\hbar$ , pues se debe tener en cuenta la rotación de un sistema de referencia fijo al electrón. Ya discutimos antes como formar un COCOOCO en este caso. Finalmente el Hamiltoniano a resolver tendrá la forma

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \begin{pmatrix} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\phi(r) & 0 \\ 0 & \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\phi(r) \end{pmatrix} + w(r) \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{L}} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\phi(r) & 0 \\ 0 & \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\phi(r) \end{pmatrix} + w(r) \left( \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \boldsymbol{\sigma}^2/4 \right), \end{aligned}$$

donde el problema de autovalores lo estudiaremos más adelante con la teoría de perturbaciones.