Capítulo 8

El Spin

8.1. El Spin del Electrón: una variable dinámica no clásica

La evidencia experimental sobre el comportamiento de los átomos en campos magnéticos - particularmente el efecto Zeeman, y la experiencia de Stern-Gerlach - conducen an 1925 a la hipótesis del spin del electrón (Goudsmit y Uhlenbeck). Los datos experimentales se podían explicar suponiendo que un electrón posee un momento magnético intrinseco $\boldsymbol{\mu}$, que solo puede tomar dos valores $\pm\mu$ si se lo "mide" en cualquier dirección espacial. Este momento no posee análogo clásico alguno; no está asociado con la rotación de una partícula de dimensiones finitas. No seguiremos aqui el desarrollo histórico, que es fascinante pero tortuoso (R. Kronig: "The Turning Point"; B.L. van der Waerden: "The Exclusion Principle and Spin"; ambos en *Memorial Volume*, Interscience, New York 1960).

Primeramente, debemos suponer que el momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ - que es directamente observable - estará representado por un operador correspondiente $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$; ¿ pero sobre que actua este operador? Suponemos la existencia de una variable dinámica (sin análogo clásico) llamada spin, a la cual estará asociado el momento magnético. Dado que la proyección de $\boldsymbol{\mu}$ en cualquier dirección solo adopta dos valores, la variable de spin s, será discreta con dos posibles valores que llamaremos $\pm$. Cada una de las tres componentes de $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ será un operador hermítico con autovalores $\pm\mu$. El espacio de estados de spin del electrón será entonces un espacio de funciones de s :

$$\psi \,:\, (\mathbf{r}, s) \,\to\, \psi(\mathbf{r}, s) \,.$$

Está claro que podemos ver a este espacio como vectores de dos componentes cada una de las cuales es una función de $\mathbf{r}$:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\cdot) \\ \psi_-(\cdot) \end{pmatrix} \;,\quad \psi_\pm(\mathbf{r}) := \psi(\mathbf{r}, \pm) \quad .$$

Si no consideramos la variable dinámica orbital $\mathbf{r}$ nos queda simplemente $\mathbb{C}^2$ como espacio de estados. O sea un estado de spin del electrón viene dado por un vector

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \;,\quad z_1, z_2 \in \mathbb{C} \quad .$$

Ahora bien, el operador $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ debe entonces actuar sobre $\mathbb{C}^2$. Para determinar este operador usaremos el comportamiento de $\boldsymbol{\mu}$ ante rotaciones del espacio tridimensional físico. Buscamos entonces, como primer paso, representar estas rotaciones por operadores unitarios que actuan sobre $\mathbb{C}^2$:

$$\text{Rotación de } \mathbb{R}^3 : D(\mathbf{e},\alpha) \longrightarrow U_{(\mathbf{e},\alpha)} \ . \tag{8.1}$$

Recordamos (viz. §6) para ello que toda rotación pura $D(\mathbf{e},\alpha)$ puede escribirse como (5.6)

$$D(\mathbf{e},\alpha) = e^{\alpha \mathbf{e}\cdot\mathbf{G}} \ ,$$

donde $\mathbf{G}$ es el vector formado por los tres generadores de las rotaciones alrededor de x , y , y z respectivamente. Estos generadores satisfacen las relaciones de conmutación (5.7):

$$[G_j, G_k] = \sum_{\ell=1}^{3} \epsilon_{j,k,\ell} G_\ell \ .$$

De la relación (8.1) de representación, y de

$$U_{(\mathbf{e},\alpha)} = e^{\alpha \mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{X}}} \ ,$$

deducimos que los operadores generadores $\widehat{\mathbf{X}} = (\widehat{X}_1, \widehat{X}_2, \widehat{X}_3)$ deben satisfacer las mismas relaciones de conmutación:

$$[\widehat{X}_j, \widehat{X}_k] = \sum_{\ell=1}^{3} \epsilon_{j,k,\ell} \widehat{X}_\ell \ .$$

Además, como $U_{(\mathbf{e},\alpha)}$ debe ser unitario, deducimos que

$$\widehat{X}_j^* = -\widehat{X}_j \ .$$

Conviene (pero no es para nada indispensable) trabajar con operadores hermíticos, y definimos [1]:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}} = 2i\widehat{\mathbf{X}} \ .$$

En términos de $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ tenemos:

$$[\widehat{\sigma}_j, \widehat{\sigma}_k] = 2i \sum_{\ell=1}^{3} \epsilon_{j,k,\ell} \widehat{\sigma}_\ell \ ; \tag{8.2}$$

i.e.,

$$[\widehat{\sigma}_1, \widehat{\sigma}_2] = 2i\widehat{\sigma}_3 \ , \quad [\widehat{\sigma}_3, \widehat{\sigma}_1] = 2i\widehat{\sigma}_2 \ , \quad [\widehat{\sigma}_2, \widehat{\sigma}_3] = 2i\widehat{\sigma}_1 \ , \ \text{todos los demas conmutadores son } 0 \ .$$

Determinemos ahora al operador $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ en terminos del terceto de matrices (2×2) , $\boldsymbol{\sigma}$. Primeramente, la relación (8.2) implica que la traza de cada σ_j se anula. Como las matrices correspondientes son hermíticas, podemos escribir:

$$\sigma_j = \begin{pmatrix} a_j & b_j \\ \bar{b}_j & -a_j \end{pmatrix} \ , \quad a_j \text{ real y } b_j \text{ complejo} \ .$$

[1] El factor 2 es conveniente, como se verá más adelante

Haciendo un cambio de base, podemos suponer que σ_3 es diagonal ($b_3 = 0\,,\ a_3 = \lambda$):

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{pmatrix} \ , \quad \lambda \text{ real y positivo } .$$

Conmutando σ_1 y luego σ_2 con σ_3 obtenemos las siguientes relaciones [2]:

$$\lambda = 1 \ , \ a_1 = a_2 = 0 \ , \ b_2 = -ib_1 \ , \ | \ b_1 \ | = 1 \ .$$

Luego,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ , \ 0 \leq \phi < 2\pi \ .$$

Ahora, es facil verificar que la matriz

$$u := \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}\phi} \end{pmatrix}$$

es unitaria, y que

$$u^*\sigma_3 u = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ , \ u^*\sigma_1 u = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \ u^*\sigma_2 u = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ .$$

Esto demuestra el siguiente resultado:

Si las tres matrices autoadjuntas (2×2) *satisfacen las relaciones (8.2), entonces existe una matriz unitaria u tal que*

$$u^*\sigma_3 u = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ , \ u^*\sigma_1 u = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \ u^*\sigma_2 u = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ .$$

Estas son las matrices de Pauli.

Las matrices de Pauli satisfacen además:

$$\sigma_j \sigma_k = i \sum_{\ell=1}^{3} \epsilon_{j,k,\ell} \sigma_\ell \ , \ \ j \neq k \ , \tag{8.3}$$

y

$$\sigma_j^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \ . \tag{8.4}$$

Para cualquier par de vectores $\mathbf{a}\,,\ \mathbf{b}$, se tiene la relación

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{a} \times \mathbf{b})\,. \tag{8.5}$$

que es de suma utilidad.

Retornamos al programa de determinar $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$. Para cualquier estado ψ ($\| \ \psi \ \| = 1$),

[2] Haga el calculo por favor

$$\boldsymbol{\mu} =< \psi, \widehat{\boldsymbol{\mu}}\psi > \ .$$

Ante una rotación $D(\mathbf{e},\alpha)$ del espacio tridimensional físico debemos tener:

$$D(\mathbf{e},\alpha)\boldsymbol{\mu} = \langle U_{(\mathbf{e},\alpha)}\psi, \widehat{\boldsymbol{\mu}} U_{(\mathbf{e},\alpha)}\psi\rangle =< \psi, U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\boldsymbol{\mu}} U_{(\mathbf{e},\alpha)}\psi\rangle \ ;$$

esta relación es equivalente a

$$U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\boldsymbol{\mu}} U_{(\mathbf{e},\alpha)} = D(\mathbf{e},\alpha)\widehat{\boldsymbol{\mu}} \ . \tag{8.6}$$

Diferenciando con respecto al ángulo α y poniendo $\alpha = 0$[3], y variando sobre todos los ejes posibles obtenemos las siguientes condiciones necesarias y suficientes para (8.6):

$$[\widehat{\sigma}_j, \widehat{\mu}_k] = 2i\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{j,k,\ell}\widehat{\mu}_\ell \ .$$

O en forma más succinta

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \times \widehat{\boldsymbol{\mu}} = 2i\widehat{\boldsymbol{\mu}} \ . \tag{8.7}$$

Es inmediato demostrar [4] directamente que estas relaciones de conmutación implican que $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ es proporcional a $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \ , \quad \gamma \text{ real} \ .$$

Uno de los motivos que indujeron a la hipotésis del spin fue que el momento angular orbital $\mathbf{L}$ no era conservado para átomos en campos magnéticos. La propuesta entonces es sumarle a $\mathbf{L}$ el momento angular $\mathbf{S}$ correspondiente al spin para obtener el momento angular total

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

que si es una magnitud conservada. Como $\mathbf{S}$ debe transformar como un vector, el operador asociado $\widehat{\mathbf{S}}$ debe cumplir las mismas reglas de conmutación (8.7) con $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ que el operador vectorial $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$, o sea que también $\widehat{\mathbf{S}}$ es proporcional a $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$. La correspondiente constante de proporcionalidad debe tener la dimensión de una acción. Además, como $-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathbf{L}}$ genera los unitarios que representan las rotaciones en el estado "orbital" y $[\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{S}}] = 0$; si queremos que $\widehat{\mathbf{J}}$ genere los unitarios que representan a las rotaciones en el espacio de los estados, debemos poner

$$\widehat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \ .$$

Asi, los tres operadores $\widehat{\mathbf{J}}$, $\widehat{\mathbf{L}}$, y $\widehat{\mathbf{S}}$ cumplen con las mismas relaciones de conmutación que son caracteristicas para un momento angular. En particular

$$[\widehat{S}_j, \widehat{S}_k] = i\hbar\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{j,k\ell}\widehat{S}_\ell \ .$$

Los autovalores del operador $\widehat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{u}$ en la dirección del versor $\mathbf{u}$ son $\pm\frac{\hbar}{2}$, y hablamos de un spin $s = 1/2$. Además $\widehat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\widehat{1} = \hbar^2 s(s+1)\widehat{1}$.

[3] Use los resultados del §6 para el miembro derecho.

[4] Esto es de hecho consecuencia de un resultado mucho más general que veremos más adelante (Wigner-Eckart).

8.2. El Spin en general

La evidencia experimental demuestra que toda partícula elemental posee un momento magnético intrinseco (este puede ser 0) tal que la medición en cualquier dirección puede tomar valores discretos distribuidos equidistantemente en un intervalo $[-\mu, \mu]$. El número n de estos valores es característico para la partícula, si bien el valor de μ dependerá por ejemplo de la magnitud de campos magnéticos aplicados, etc. Como lo acabamos de hacer para el caso de spin $s = 1/2$, se le asocia al momento magnético intrinseco un spin via el análisis de las representaciones de las rotaciones. Para ello buscamos que la dimensión del espacio de Hilbert asociado al spin tenga dimensión minimal, o sea n. Ahora bien es un resultado matemático que, salvo una transformación unitaria, hay una única representación proyectiva unitaria $\{U_{(\mathbf{e},\alpha)} : (\mathbf{e}, \alpha) \in SO(3)\}$ del grupo de rotaciónes $SO(3)$ (o bien una única representación unitaria de su grupo de cubrimiento $SU(2)$) en $\mathbb{C}^n$ de modo que se cumpla la siguiente condición de irreducibilidad

$$U^*_{(\mathbf{e},\alpha)} A U_{(\mathbf{e},\alpha)} = A \implies A = z\mathbf{1} \text{ con } z \in \mathbb{C} \,. \tag{8.8}$$

El operador de spin $\mathbf{S} = (S_1, S_2, S_3)$ es simplemente $i\hbar \cdot$ Generador :

$$U_{(\mathbf{e},\alpha)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \mathbf{e}\cdot\mathbf{S}} \,.$$

Se tiene:

$$[S_j, S_k] = i\hbar \sum_{\ell=1}^{3} \epsilon_{j,k\ell} S_\ell \,.$$

Los autovalores del operador $\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}$ en la dirección del versor $\mathbf{u}$ son los n números

$$-\hbar s \,,\ -\hbar(s-1) \,,\ \cdots \,,\ \hbar(s-1) \,,\ \hbar s \,,$$

y hablamos de un spin de magnitud $s = \frac{n-1}{2}$, i.e., $n = 2s+1$. La condición de irreducibilidad (8.8) es equivalente a

$$[A, S_j] = 0 \text{ para } j = 1, 2, 3 \implies A = z\mathbf{1} \text{ con } z \in \mathbb{C} \,. \tag{8.9}$$

Y, ya que $\mathbf{S}^2$ conmuta con cada componente de $\mathbf{S}$, necesariamente $\mathbf{S}^2$ es un multiplo de la identidad, concretamente: $\widehat{\mathbf{S}}^2 = \hbar^2 s(s+1)\widehat{1}$. Nuevamente, el momento magnético intrinseco μ estará representado por un operador que es proporcional a $\mathbf{S}$. En resumen, un spin elemental de magnitud s (un número semientero no-negativo) es el generador de una representación unitaria irreducible de $SU(2)$ en $\mathbb{C}^{2s+1}$.

8.3. Las interacciones de un Spin

La energía de un momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ en un campo magnético $\mathbf{H}$ es $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}$. El operador que representa el momento magnético $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$, asociado a un spin s es proporcional al operador de spin $\widehat{\mathbf{S}}$:

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g\frac{e\hbar}{mc}\widehat{\mathbf{S}} \,,$$

donde e es la carga elemental, m es la masa de la partícula, y c es la velocidad de la luz. El factor g que no tiene dimensión, es característico para la partícula; el valor puede obtenerse a partir de ecuaciones relativistas (Ecuación de Dirac par el electrón, etc.). Además el spin, mejor dicho el correspondiente momento magnético, interactua con el momento orbital. En efecto, si la partícula tiene carga eléctrica, su movimiento orbital produce un campo magnético; la interacción correspondiente (que se verá más adelante) resulta proporcional a $\widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{S}}$.

8.4. Sistemas de dos niveles: polarización

Llamamos a un sistema de dos niveles si el espacio de estados tiene dimensión 2. El ejemplo mas pertinente es el del caso de un spin $1/2$; pero aparecen en física muchos otros ejemplos, en general en discusiónes aproximativas. Hay una particularidad en dimensión 2 : todo operador A sobre $\mathbb{C}^2$ es combinación lineal de $\widehat{\sigma}_1$, $\widehat{\sigma}_2$, $\widehat{\sigma}_3$, y $\widehat{\sigma}_o := \widehat{1}$:

$$A = \frac{1}{2}\left(tr(A)\sigma_o + \sum_{j=1}^{3} tr(A\widehat{\sigma}_j)\widehat{\sigma}_j \right) . \tag{8.10}$$

Esta identidad puede verificarse explicitamente en términos matriciales, pero es consecuencia inmediata del siguiente resultado que usted puede demostrar sin dificultad alguna:

Sea $\mathcal{H}$ un espacio de Hilbert de dimensión finita.

$$<< \widehat{A}, \widehat{B} >> := tr(\widehat{A}^* \widehat{B})/2 ,$$

define un producto escalar sobre el espacio vectorial de los operadores lineales sobre $\mathcal{H}$.

Ahora, en el caso de dos niveles (usando (8.3), (8.4), y $tr(\sigma_j) = 0$, $j \neq 0$) es inmediato verificar que:

$$<< \widehat{\sigma}_j, \widehat{\sigma}_k >> = \delta_{jk} , \quad j, k \in \{0, 1, 2, 3\} .$$

Como hay a lo sumo cuatro operadores no nulos linealmente independientes en dimensión 2 , las cuatro σ forman una base ortonormal, y (8.10) no es otra cosa que el desarrollo de $\widehat{A}$ en esta base. Reescribimos la relación (8.10) como

$$A = \frac{1}{2} tr(A)\mathbf{1} + \mathbf{A} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad , \quad \mathbf{A} := \frac{1}{2} tr(A\widehat{\boldsymbol{\sigma}}) . \tag{8.11}$$

Si el estado del sistema está dado por un vector normalizado $\psi \in \mathbb{C}^2$ y utilizamos (8.11), entonces el valor esperado de $\widehat{A}$ en este estado es

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \frac{1}{2} tr(\widehat{A}) + \langle \psi, \mathbf{A} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\psi \rangle = \frac{1}{2} tr(A) + \mathbf{A} \cdot \langle \psi, \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\psi \rangle = \frac{1}{2} tr(A) + \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} ,$$

donde convenimos que la *polarización* $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^3$ asociada con el estado es

$$\mathbf{P} := \langle \psi, \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\psi \rangle . \tag{8.12}$$

Observese que módulo multiplicación por $\hbar$, la polarización es el valor esperado de $2\mathbf{S}$ y por ende un vector cuyas tres componentes son reales y de módulo menor o igual a 1. Más especificamente, Se puede demostrar que el vector polarización es unitario, i.e.,

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} = 1 .$$

Interesa en general la dinámica dada por un Hamiltoniano $\widehat{H}$ autoadjunto. De la ecuación de movimiento

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi_t = \widehat{H}\psi_t \ , \ \ \psi_o = \psi \ ,$$

y su solución

$$\psi_t = \widehat{U}_t\psi \ , \ \ \widehat{U}_t = e^{-i\widehat{H}t/\hbar} \ ,$$

obtenemos inmediatamente que

$$\mathbf{P}_t = \langle\psi_t, \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_t\rangle = \langle\psi, \widehat{U}_{-t}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{U}_t\psi\rangle \ ,$$

la polarización al tiempo t, satisface la ecuación de movimiento

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}_t = \frac{d}{dt}\langle\psi, \widehat{U}_{-t}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{U}_t\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi, \widehat{U}_{-t}[\widehat{H}, \widehat{\boldsymbol{\sigma}}]\widehat{U}_t\psi\rangle \ .$$

Usando (8.11), obtenemos:

$$[\widehat{H}, \widehat{\sigma}_j] = [\mathbf{H}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \widehat{\sigma}_j] = \mathbf{H}\cdot\ [\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \widehat{\sigma}_j]$$

$$= \sum_{k=1}^{3} H_k[\widehat{\sigma}_k, \widehat{\sigma}_j] = 2i\sum_{k=1}^{3} H_k \sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{k,j,\ell}\widehat{\sigma}_\ell = -2i\sum_{k=1}^{3}\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{j,k,\ell}H_k\widehat{\sigma}_\ell = -2i(\mathbf{H}\times\widehat{\boldsymbol{\sigma}})_j \ ;$$

o sea:

$$[\widehat{H}, \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\,] = -2i\,\mathbf{H}\times\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \ .$$

Luego,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}_t = \frac{2}{\hbar}\langle\psi, \widehat{U}_{-t}\,(\mathbf{H}\times\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\,)\,\widehat{U}_t\psi\rangle = \frac{2}{\hbar}\mathbf{H}\ \times\langle\psi, \widehat{U}_{-t}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{U}_t\psi\rangle = \frac{2}{\hbar}\mathbf{H}\times\mathbf{P}_t \ .$$

La ecuación de movimiento es entonces

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}_t = \frac{2}{\hbar}\mathbf{H}\times\mathbf{P}_t \ \ , \ \ \mathbf{P}_o = \mathbf{P} \ ,$$

que es *enteramente clásica* y provee via la fórmula para los valores esperados todo lo que queremos saber. Note que esta ecuación es análoga a la de un rotor clásico. La solución $\mathbf{P}_t$ precesa alrededor de $\mathbf{H}$ con velocidad angular constante $(2/\hbar)|\mathbf{H}|$.

Observese que lo hecho demuestra que un spin 1/2 puro –desconsiderando las variables orbitales– es totalmente equivalente a un rotor clásico, o sea un punto que se mueve en la superficie de la esfera de radio 1 en $\mathbb{R}^3$. En este sentido, el spin 1/2 es un sistema dinámico clásico.