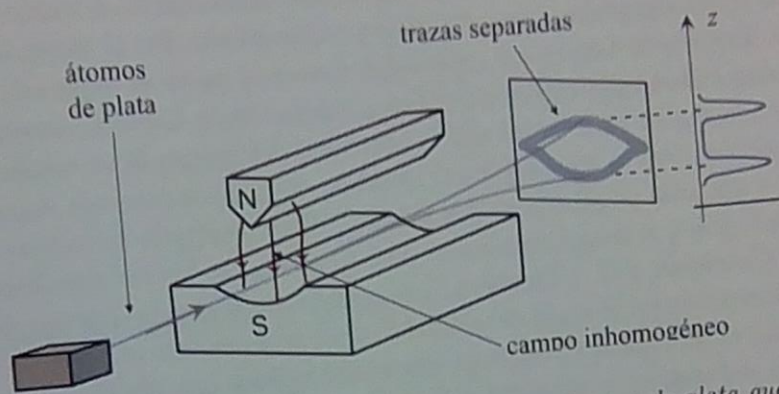


## Capítulo 11

### El espín y la ecuación de Pauli\*

#### 11.1. Introducción



**Figura 11.1:** En el experimento de Stern-Gerlach, los átomos de plata que se mueven perpendicularmente al campo inhomogéneo son desviados por la fuerza magnética debida al gradiente del campo. En lugar de las tres trazas que predecía la argumentación teórica de esos años, se observaron dos trazas.

La configuración electrónica, y la explicación de las líneas de emisión de los átomos en campo magnético observadas por P. Zeeman, fueron temas importantes de la naciente física cuántica y de la polémica que, alrededor de 1920, caracterizaba el ambiente científico. La imposibilidad de explicar éstos y otros problemas con los postulados de Bohr mantuvo la resistencia de muchos físicos para aceptar una teoría de postulados y modelos. Esto a pesar de los esfuerzos de físicos tan importantes como Sommerfeld por formalizar la vieja teoría cuántica del átomo de Bohr. Entre los físicos inconformes estaba Otto Stern, que había sido

asistente de Einstein en Zurich. Stern tenía experiencia produciendo haces de átomos. En 1921, decidió estudiar la dinámica de los átomos en presencia de un campo externo. Su objetivo no era encontrar evidencias del espín sino visualizar la cuantización espacial, como se le llamaba en esa época a la cuantización del momento magnético, que es esencialmente la misma que la del momento angular. Se sabe de la teoría electromagnética que una partícula con momento magnético  $\mu$ , en un campo magnético variable, siente una fuerza igual al gradiente de su energía potencial  $\mu \cdot \mathbf{B}$ , es decir:

$$\mathbf{F} = \nabla(\mu \cdot \mathbf{B}). \quad (11.1)$$

Si la dirección del campo es  $\hat{\mathbf{z}}$ , y  $\mu = \mu_B \hat{\mathbf{L}}$ , la fuerza sobre los átomos será:

$$F_z = \mu_B \hat{l}_z B. \quad (11.2)$$

En consecuencia, la trayectoria de los átomos se desdoblaría en tantas trayectorias como valores posibles tiene el número cuántico  $m_z$ . En el capítulo anterior se mostró que  $m_z = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ . Por esta razón se esperaba observar  $2l+1$  trazas. El arreglo experimental que usaron Stern-Gerlach, arreglo que se muestra en la figura 11.1, es tal que la dirección del campo  $\mathbf{B}$  no cambia mucho con la posición pero sí su magnitud. Después de muchos intentos encontraron, finalmente, que sólo se producen dos trazas.<sup>56</sup> Este resultado introdujo un poco más de confusión y nuevos argumentos para justificarlos. No fue sino hasta 1926, cuando S. Goudsmit y G. Uhlenbeck,<sup>57</sup> reinterpretaron el experimento de Stern-Gerlach e introdujeron el espín del electrón como un *momento angular intrínseco*, que se aclaró el problema. El espín es una variable física con dos componentes en la dirección del campo, y asociado a él el momento magnético intrínseco  $\mu_e$  del electrón. En 1921, A. Compton, fue el primero en sugerir la posibilidad de que el electrón poseyera un momento angular intrínseco semientero. En 1925 Kronig sugirió a Pauli la idea del espín del electrón. Pauli postuló después la existencia de una propiedad cuántica bivaluada, sin análogo clásico<sup>58</sup>.

Si el electrón posee, además de su momento orbital  $\hat{\mu}_L$ , un momento magnético intrínseco definido como

$$\mu_e = g_s \mu_B \hat{\mathbf{S}}, \quad (11.3)$$

<sup>56</sup> Una anécdota interesante de las circunstancias de este experimento aparece en B. Friedrich y D. Herschbach, *Physics Today* diciembre 2003, pg 53.

<sup>57</sup> S. Goudsmit y G. Uhlenbeck, *Nature* **117** 264 (1926).

<sup>58</sup> W. Pauli, *Z. Physik* **31**, 765 (1925) y la *Disertación Nobel* de W. Pauli (1946).

se le puede asociar una energía potencial

$$-\frac{\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}_e}{\hbar}, \quad (11.4)$$

que debe incorporarse al hamiltoniano en la ecuación de Schrödinger

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_e}{\hbar} + V(\mathbf{r}) \right) \phi(\mathbf{r}, s) = E \phi(\mathbf{r}, s). \quad (11.5)$$

La inclusión del término dependiente de momento angular intrínseco  $\hat{S}$  añade, a los grados de libertad espaciales, los grados de libertad del espín. Esto lo indicamos en la notación de las funciones de onda  $\phi(\mathbf{r}, s)$  que se construyen como el producto

$$\phi(\mathbf{r}, s) = \varphi(\mathbf{r})\chi(s), \quad (11.6)$$

en el que  $\varphi(\mathbf{r})$  es la función de onda dependiente de  $\mathbf{r}$  y  $\chi(s)$  un vector dependiente del espín, denominado *espinor*. El espinor es, en general, una combinación lineal de los estados  $\chi_{\uparrow}$  y  $\chi_{\downarrow}$  correspondientes a las proyecciones de  $\hat{\mathbf{S}}$ , paralela y antiparalela al campo. Estas eigenfunciones de  $\hat{S}_z$  se representan generalmente con los vectores (espinores):

$$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.7)$$

Y satisfacen las ecuaciones de eigenvalores

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.8)$$

Si el espín es un momento angular, debe satisfacer reglas de conmutación similares a las que satisfacen el momento angular  $\hat{\mathbf{L}}$  y sus componentes. Esto significa que

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \quad (11.9)$$

y también que

$$[\hat{\mathbf{S}}, \hat{S}_i] = i\hbar(\hat{\mathbf{x}}_j\hat{S}_j - \hat{\mathbf{x}}_k\hat{S}_k). \quad (11.10)$$

En la sección que sigue, utilizaremos las relaciones (11.9) para mostrar que los momentos angulares, compatibles con estas condiciones, pueden ser enteros o semienteros. Obtendremos los eigenvalores de  $\hat{S}_z$  y  $\hat{S}^2$ , y también deduciremos las representaciones matriciales del espín.



## 11.2. Eigenvalores y representaciones del espín

### 11.2.1. Eigenvalores de $\hat{S}_z$ y $\hat{S}^2$

En el capítulo 9 se obtuvieron los eigenvalores y eigenfunciones de  $\hat{L}_z$  y  $\hat{L}^2$ , utilizando su forma explícita. Aquí deduciremos los eigenvalores y eigenfunciones  $\hat{S}_z$  y  $\hat{S}^2$ , a partir de las relaciones de conmutación. Para esto necesitamos introducir los operadores de ascenso y descenso  $\hat{S}_-$  y  $\hat{S}_+$ , análogos a los operadores  $\hat{L}_-$  y  $\hat{L}_+$  definidos en el capítulo 9 y, con su ayuda, obtendremos algunas identidades que nos permitirán sin mucha dificultad concluir varios resultados interesantes.

Definamos entonces los operadores

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \text{y} \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \quad (11.11)$$

Es fácil mostrar que estos operadores satisfacen las siguientes relaciones

$$[\hat{S}_\mp, \hat{S}_z] = \pm \hbar \hat{S}_\mp, \quad (11.12)$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hbar \hat{S}_z. \quad (11.13)$$

Éstos, al igual que  $\hat{L}_+$  y  $\hat{L}_-$  son también de ascenso y descenso, es decir que son operadores que al actuar sobre las eigenfunciones de  $\hat{S}_z$  producen eigenfunciones que corresponden a estados vecinos, con eigenvalor incrementado o disminuido. En efecto, supongamos que tenemos las ecuaciones de eigenvalores

$$\hat{S}^2 \chi = a \chi \quad \text{y} \quad \hat{S}_z \chi = b \chi, \quad (11.14)$$

Si actuamos con el operador  $\hat{S}_+$  sobre la segunda de estas ecuaciones, tenemos

$$\hat{S}_+ \hat{S}_z \chi = b \hat{S}_+ \chi; \quad (11.15)$$

se puede mostrar, con ayuda de la relación (11.12), que la ecuación anterior puede expresarse en la forma

$$\hat{S}_z \hat{S}_+ \chi = (b + \hbar) \hat{S}_+ \chi. \quad (11.16)$$

Esta relación no sólo muestra que  $\hat{S}_+ \chi$  es una eigenfunción de  $\hat{S}_z$ , muestra también que  $\hat{S}_+ \chi$  es un estado de  $\hat{S}_z$  con eigenvalor incrementado en  $\hbar$ , es decir, que  $\hat{S}_+$  es un operador de ascenso. Si repetimos  $n$  veces la acción de  $\hat{S}_+$ , tendremos la relación

$$\hat{S}_z \hat{S}_+^n \chi = (b + n\hbar) \hat{S}_+^n \chi. \quad (11.17)$$

Supongamos ahora que  $\chi_M$  es el estado con el máximo eigenvalor  $b_M$  de  $\hat{S}_z$ . En tal caso

$$\hat{S}_+ \chi_M = 0. \quad (11.18)$$

De la misma manera se puede mostrar que

$$\hat{S}_z \hat{S}_- \chi = (b - \hbar) \hat{S}_- \chi, \quad (11.19)$$

con

$$\hat{S}_z \hat{S}_-^n \chi = (b - n\hbar) \hat{S}_-^n \chi. \quad (11.20)$$

Igualmente, si  $\chi_m$  es el estado de mínimo eigenvalor  $b_m$  de  $\hat{S}_z$ , se tiene

$$\hat{S}_- \chi_m = 0. \quad (11.21)$$

Con estos resultados y las relaciones

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 - \hbar \hat{S}_z, \quad (11.22)$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- = \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z, \quad (11.23)$$

mostraremos que el espín puede ser semientero y obtendremos, además, los eigenvalores de  $\hat{S}_z$  y  $\hat{S}^2$ . Veamos: si el operador  $\hat{S}_- \hat{S}_+$  actúa sobre el estado  $\chi_M$ , tenemos:

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ \chi_M = (\hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 - \hbar \hat{S}_z) \chi_M = (a - b_M^2 - \hbar b_M) \chi_M = 0. \quad (11.24)$$

Igualmente, la acción del operador  $\hat{S}_+ \hat{S}_-$  sobre el estado  $\chi_m$ , nos da

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- \chi_m = (\hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z) \chi_m = (a - b_m^2 + \hbar b_m) \chi_m = 0. \quad (11.25)$$

Estas ecuaciones se satisfacen sólo si

$$a - b_m^2 + \hbar b_m = 0 \quad \text{y si} \quad a - b_M^2 - \hbar b_M = 0. \quad (11.26)$$

Supongamos ahora que  $b_M = b_m + n\hbar$ . Combinando las anteriores ecuaciones, se obtiene

$$2b_M \hbar(n+1) - (n+1)n\hbar^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad b_M = \frac{n\hbar}{2}. \quad (11.27)$$

Sustituimos  $b_M$  en la segunda ecuación de (11.26) y tenemos el eigenvalor

$$a = \hbar^2 \frac{n\hbar}{2} \left( 1 + \frac{n\hbar}{2} \right), \quad (11.28)$$

de  $\hat{S}^2$ . Es claro que el número  $n$  puede ser par, digamos  $2l$ . En este caso el eigenvalor de  $\hat{S}^2$  será  $\hbar^2 l(l+1)$ , con  $2l+1$  proyecciones. Pero  $n$  puede ser también impar, por ejemplo  $n=1$ . En este caso el eigenvalor de  $\hat{S}^2$  será  $\hbar^2 (1/2+1)/2$ , y el número de proyecciones en la dirección del campo  $2(1/2)+1=2$ , que es precisamente el encontrado en el experimento de Stern y Gerlach. Esto sugiere que al momento intrínseco  $\mathbf{S}$  le corresponde un número cuántico  $s=1/2$ , tal que

$$\hat{S}^2 \chi = \hbar^2 s(s+1) \chi. \quad (11.29)$$

¿Cuáles son los eigenvalores de  $\hat{S}_z$ ? Si  $n=1$ , los eigenvalores máximo y mínimo son

$$b_M = \frac{\hbar}{2}, \quad \text{y} \quad b_m = b_M - n\hbar = -\frac{\hbar}{2}. \quad (11.30)$$

En consecuencia:

$$\hat{S}_z \chi_M = \frac{\hbar}{2} \chi_M \quad \Rightarrow \quad \chi_M = \chi_{\uparrow}; \quad (11.31)$$

$$\hat{S}_z \chi_m = -\frac{\hbar}{2} \chi_m \quad \Rightarrow \quad \chi_m = \chi_{\downarrow}. \quad (11.32)$$

En lo que sigue, los eigenvalores de  $\hat{S}_z$  se denotarán como  $m_s \hbar$ . Se entiende aquí que  $m_s = \pm 1/2$ .  $m_s$  es el cuarto número cuántico que se necesitaba para resolver el problema de la configuración electrónica. Si, a los estados electrónicos los representamos con el ket  $|nlm_z m_s\rangle$ , es claro que por cada estado  $|nlm_z\rangle$  se tienen en realidad dos estados:  $|nlm_z 1/2\rangle$  y  $|nlm_z -1/2\rangle$ . Esto explica que el número de estados degenerados por cada nivel de energía sea el doble de los que se predicen en ausencia de espín. Es importante observar que, si  $\mathbf{B} = 0$ , la energía asociada al espín desaparece del hamiltoniano. Por esto el hamiltoniano que se consideró en el capítulo 10 era correcto. Lo que andaba mal era la contabilidad de los estados degenerados. En lugar de  $2n^2$  se obtenía  $n^2$  estados por nivel de energía. A la degeneración en  $l$  y  $m_z$  se le debe añadir la degeneración en  $m_s$ .



11.2.2. Representaciones del espín y las matrices  $\sigma$  de Pauli

En el capítulo 9 se dedujeron las fórmulas (9.67) y (9.68) para obtener con ellas las representaciones del momento angular. Esas fórmulas adaptadas al espín toman la forma

$$\hat{S}_+ |sm_s\rangle = \hbar\sqrt{(s+m_s+1)(s-m_s)} |s, m_s+1\rangle, \quad (11.33)$$

$$\hat{S}_- |sm_s\rangle = \hbar\sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)} |s, m_s-1\rangle, \quad (11.34)$$

y podríamos usarlas para obtener las representaciones de los distintos operadores de espín. Dejamos como ejercicio para el estudiante esta alternativa. Obtendremos aquí las representaciones matriciales a partir de sus relaciones de conmutación y el carácter hermitiano de los operadores. Comenzaremos con la representación matricial de  $\hat{S}_z$  en la base de eigenfunciones  $\chi_\uparrow$  y  $\chi_\downarrow$ . En esta base, la representación  $S_z$  de  $\hat{S}_z$  la formamos con los diferentes elementos de matriz  $\langle\chi_i|\hat{S}_z|\chi_j\rangle$ , de tal forma que

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle\chi_\uparrow|\hat{S}_z|\chi_\uparrow\rangle & \langle\chi_\uparrow|\hat{S}_z|\chi_\downarrow\rangle \\ \langle\chi_\downarrow|\hat{S}_z|\chi_\uparrow\rangle & \langle\chi_\downarrow|\hat{S}_z|\chi_\downarrow\rangle \end{pmatrix}. \quad (11.35)$$

Si utilizamos las ecuaciones de eigenvalores y la ortogonalidad de  $\chi_\uparrow$  y  $\chi_\downarrow$ , tenemos:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.36)$$

cuyo cuadrado es

$$S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} I_2. \quad (11.37)$$

De las relaciones de conmutación, que son las mismas que para las representaciones matriciales, se pueden deducir otras muy útiles. Por ejemplo, si tomamos la relación

$$S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y \quad (11.38)$$

y la multiplicamos a izquierda y derecha por  $S_z$  tenemos, después de sustituir  $S_z^2$  por  $\hbar^2 I_2/4$ , la igualdad

$$\frac{\hbar^2}{4} (S_x S_z - S_z S_x) = i\hbar S_z S_y S_z, \quad (11.39)$$

que se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{4}S_y = S_z S_y S_z. \quad (11.40)$$

Aquí se puede multiplicar nuevamente, desde la derecha, por  $S_x$ . Eliminando factores, se tiene el anticonmutador

$$S_y S_z + S_z S_y = 0. \quad (11.41)$$

De la misma forma se obtiene

$$S_x S_x + S_x S_x = 0, \quad (11.42)$$

$$S_x S_y + S_y S_x = 0. \quad (11.43)$$

Estos anticonmutadores, combinados con los conmutadores, nos permiten deducir, entre otras, las siguientes relaciones

$$2S_i S_j = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k. \quad (11.44)$$

Obtendremos ahora las representaciones matriciales de  $\hat{S}_x$  y  $\hat{S}_y$ . Para esto, proponemos las matrices

$$S_x = \begin{pmatrix} a_x & b_x \\ c_x & d_x \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad S_y = \begin{pmatrix} a_y & b_y \\ c_y & d_y \end{pmatrix}, \quad (11.45)$$

con entradas complejas en general. Si sustituimos por estas matrices en (11.44), encontramos fácilmente que

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{c_x} \\ c_x & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{c_x} \\ i c_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.46)$$

Para que estas matrices sean hermitianas se requiere que  $c_x = \hbar/2$ . Consecuentemente la forma final de las matrices  $S_x$  y  $S_y$  es

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{con} \quad S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} I_2; \quad (11.47)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{con} \quad S_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} I_2. \quad (11.48)$$



Es usual y conveniente definir el vector

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \mathbf{S}, \quad (11.49)$$

cuyas componentes son las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.50)$$

Es fácil verificar que estas matrices satisfacen las siguientes propiedades

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (11.51)$$

$$\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i = i \epsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (11.52)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (11.53)$$

En la deducción de la ecuación de Pauli serán necesarias las siguientes identidades con el vector matricial  $\boldsymbol{\sigma}$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}, \quad (11.54)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla + \mathbf{f}))(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla + \mathbf{f})) = (\nabla + \mathbf{f})(\nabla + \mathbf{f})I_2 + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{f}). \quad (11.55)$$

### 11.2.3. La ecuación de Pauli\*

En el hamiltoniano de la ecuación (11.5) introducimos la energía potencial dependiente del espín, en analogía con el término del momento magnético orbital que surgió naturalmente cuando se introdujo el campo magnético y se utilizó la transformación  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c$ , que prescribe la física clásica en presencia de un campo magnético. Como el espín es una propiedad puramente cuántica, no existe el análogo clásico. La alternativa es entonces modificar la ecuación de Schrödinger de tal forma que la interacción espín-órbita aparezca cuando hay campo magnético y desaparezca en ausencia de él. Esta extensión la hizo W. Pauli en 1927, y mostró que, si se sustituye el vector  $\hat{\mathbf{p}}$  por la matriz<sup>59</sup>  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ , la nueva ecuación es exactamente la misma que la vieja ecuación de Schrödinger; pero si hay un campo magnético externo, surge la ecuación (11.5) con sus dos

<sup>59</sup> Simultáneamente debe hacerse el cambio  $V(\mathbf{r})$  por  $V(\mathbf{r})I_2$ . Aunque no se escriba la matriz unidad debe entenderse que, cuando estamos en la forma matricial,  $V(\mathbf{r})$  significa  $V(\mathbf{r})I_2$ .

términos de energía: la del momento orbital y la de espín. Vamos a ver esto en detalle.

Si en la ecuación (11.54) hacemos  $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \hat{\mathbf{p}}$ , tenemos

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} I_2. \quad (11.56)$$

Esta relación nos dice que, si cambiamos el hamiltoniano

$$\frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad \text{por} \quad \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{2m} + V(\mathbf{r}) I_2, \quad (11.57)$$

y consecuentemente cambiamos la función de onda  $\varphi(\mathbf{r})$  por  $\phi(\mathbf{r}, s) = \varphi(\mathbf{r})\chi(s)$ , la ecuación de Schrödinger se transforma en

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{2m} \phi(\mathbf{r}, s) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, s) = E\phi(\mathbf{r}, s), \quad (11.58)$$

que depende del espín sólo si hay campo magnético. Cuando no hay campo y tenemos presente la ecuación (11.56) no depende de  $\boldsymbol{\sigma}$ , la ecuación coincide con la ecuación de Schrödinger que conocemos. Pero si hay un campo magnético externo y el momento  $\hat{\mathbf{p}}$  se transforma en  $\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c$ , entonces la ecuación anterior se transforma en

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c))(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c))}{2m} \phi(\mathbf{r}, s) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, s) = E\phi(\mathbf{r}, s), \quad (11.59)$$

que sí depende de  $\boldsymbol{\sigma}$  de la manera correcta. En efecto, si en la identidad (11.55) sustituimos  $\nabla$  por  $-i\hbar\nabla (= \hat{\mathbf{p}})$  y  $\mathbf{f}$  por  $q\mathbf{A}/c$ , el término de energía cinética del hamiltoniano

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c))(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c))}{2m}, \quad (11.60)$$

se transforma en

$$\frac{(\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c) \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c)}{2m} I_2 + \frac{\hbar q}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (11.61)$$

En la sección anterior, dedicada al átomo de hidrógeno en campo magnético, vimos que en la norma de Coulomb

$$(\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c) \cdot (\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}/c) = \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2 B^2}{c^2} \frac{1}{4} (x^2 + y^2). \quad (11.62)$$

Esto significa que, en presencia del campo magnético, la ecuación de Schrödinger se transforma en la ecuación

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{q}{2mc} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{\hbar q}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + \frac{q^2 B^2}{c^2} \frac{(x^2 + y^2)}{4} + V(\mathbf{r}) \right) \phi(\mathbf{r}, s) = E\phi(\mathbf{r}, s). \quad (11.63)$$

Si sustituimos  $q$  por  $-e$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  por  $2\mathbf{S}/\hbar$  e introducimos el magnetón de Bohr  $\mu_B$  tenemos

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} + \frac{q^2 B^2}{c^2} \frac{(x^2 + y^2)}{4} + V(\mathbf{r}) \right) \phi(\mathbf{r}, s) = E\phi(\mathbf{r}, s), \quad (11.64)$$

con los factores de Landé  $g_L = 1$  y  $g_S = 2$ . Ésta es la ecuación de Pauli para el electrón de espín  $1/2$  en campo magnético. Es precisamente la ecuación que se propuso en (11.5). En el átomo de hidrógeno,  $V(\mathbf{r})$  es un potencial central y el potencial parabólico se puede despreciar. Debemos señalar que todas las transformaciones, que se hicieron aquí, estuvieron restringidas al término cinético, sin ninguna condición específica sobre el potencial. En consecuencia, los resultados que obtuvimos son también válidos para describir la dinámica de cargas en otro tipo de potencial. Deben tomarse en consideración si se estudia el transporte de partículas cargadas en estructuras semiconductoras y superredes magnéticas. Estos sistemas se encuentran, por ejemplo, en la espintrónica.

Debido a que la función  $\phi(\mathbf{r}, s)$  es vectorial, cuya dimensión depende del espín, el hamiltoniano en la ecuación de Pauli es una matriz. Cuando el espín es  $1/2$ , la dimensión es  $2 \times 2$ . Se entiende que los términos no matriciales del hamiltoniano  $\hat{H}$  están multiplicados por la matriz unidad  $I_N$  correspondiente al espín. Si el espín es  $1/2$  se entiende que

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi(\mathbf{r}, s) &= \hat{H}I_2\phi(\mathbf{r}, s) = \hat{H} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \\ &= \hat{H}\varphi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.65)$$

En general, la matriz  $I_2$  se escribe, explícitamente, sólo cuando es necesario.



### 11.3. La interacción espín-órbita

Con la interacción espín-campo se pudo explicar el efecto Zeeman anómalo, pero el espaciamiento de las líneas de la estructura fina, como se denomina a las líneas que se observan en presencia de campo, era la mitad del que se predice con la ecuación de Pauli. Esta dificultad no podía resolverse cambiando el factor de Landé  $g$  de 2 a 1. La solución vino de la teoría relativista del electrón de Dirac. Teoría que no estudiamos aquí pero que puede consultarse en los múltiples libros de texto que la discuten. L. H. Thomas en 1926 mostró<sup>60</sup> que, si el electrón con momento magnético  $\boldsymbol{\mu}_e = -g\mu_B\hat{\mathbf{S}}/\hbar$  se mueve en un campo externo  $\mathbf{E}$ , la derivada temporal del momento angular intrínseco  $\hat{\mathbf{S}}$ , en el sistema de coordenadas del electrón, es

$$\left. \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} \right|_{\text{reposito}} = -\boldsymbol{\mu}_e \times \left( \frac{\mathbf{v}}{c^2} \times \mathbf{E} \right). \quad (11.66)$$

Si el sistema de coordenadas del electrón se mueve con una velocidad angular  $\boldsymbol{\omega}_T$  (la frecuencia de Thomas), la derivada temporal del momento angular intrínseco  $\hat{\mathbf{S}}$ , en el sistema que no rota, es

$$\left. \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} \right|_{\text{nr}} = \left. \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} \right|_{\text{reposito}} + \hat{\mathbf{S}} \times \boldsymbol{\omega}_T; \quad (11.67)$$

con

$$\boldsymbol{\omega}_T = -\frac{e}{2m_e c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}. \quad (11.68)$$

Si recordamos que  $\mu_B = e\hbar/2m_e$  y sustituimos, se tiene

$$\left. \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} \right|_{\text{nr}} = -\boldsymbol{\mu}_e \times \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2} + \frac{1}{gc^2} \boldsymbol{\mu}_e \times (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) = \frac{1-g}{g} \boldsymbol{\mu}_e \times \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2}. \quad (11.69)$$

Esto significa que la energía potencial del momento magnético será (con  $g=2$ ):

$$U = \boldsymbol{\mu}_e \cdot \frac{1-g}{g} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2}. \quad (11.70)$$

<sup>60</sup> L. H. Thomas, *Nature*, 117, 514 (1926).

Esto significa que para valores definidos de  $l$  y  $s$  las eigenfunciones deben representarse con funciones caracterizadas por los números cuánticos  $j, l, s, m_j$ . Si representamos a las eigenfunciones con los bras  $|j l s m_j\rangle$ , las ecuaciones de eigenvalores de  $\hat{J}^2$  y  $\hat{J}_z$  serán:

$$\hat{J}^2 |j l s m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j l s m_j\rangle, \quad (11.75)$$

$$\hat{J}_z |j l s m_j\rangle = \hbar m_j |j l s m_j\rangle, \quad \text{con } |m_j| \leq j. \quad (11.76)$$

¿Qué valores pueden tomar  $j$  y  $m_j$ ? Supongamos que  $l$  y  $s$  están dados. Hay un total de  $(2l+1)(2s+1)$  posibles orientaciones de  $\hat{\mathbf{L}}$  y  $\hat{\mathbf{S}}$ , representadas por los diferentes valores de  $m_l$  y  $m_s$ . El valor más grande que puede tomar  $j$  es  $l+s$ , y el más pequeño  $|l-s|$ . El máximo de  $m_j$  se tiene cuando  $m_l$  y  $m_s$  toman su valor máximo, y el mínimo cuando toman sus valores mínimos; esto significa que

$$l+s \geq j \geq |l-s| \quad \text{y} \quad m_j = -l-s, -l-s+1, \dots, l+s-1, l+s. \quad (11.77)$$

Se puede verificar fácilmente que el número de estados caracterizados por los números cuánticos  $j, l, s, m_j$  es igual que el número de estados caracterizados por los números cuánticos  $l, m_l, s, m_s$ . En general se puede pasar de la representación  $|j l s m_j\rangle$  a la representación  $|l m_l s m_s\rangle$ . Éste es un tema muy amplio en la literatura del momento angular, que está más allá de nuestro propósito. El estudiante interesado puede consultar la literatura especializada.

De la definición de  $\hat{\mathbf{J}}$ , es evidente que

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}. \quad (11.78)$$

Los eigenvalores del operador  $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$  pueden obtenerse fácilmente puesto que

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (11.79)$$

En efecto,

$$(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) |j l s m_j\rangle = \hbar^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} |j l s m_j\rangle. \quad (11.80)$$

## 11.5. Problemas

1. Muestre que los operadores

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \text{y} \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y, \quad (11.81)$$

satisfacen a las relaciones de conmutación

$$[\hat{S}_\mp, \hat{S}_z] = \pm\hbar\hat{S}_\mp. \quad (11.82)$$

2. Demuestre que si
- $\hat{S}_z \chi = b \chi$
- , entonces

$$\hat{S}_z \hat{S}_+ \chi = (b + \hbar) \hat{S}_+ \chi, \quad (11.83)$$

$$\hat{S}_z \hat{S}_- \chi = (b - \hbar) \hat{S}_- \chi. \quad (11.84)$$

3. Deduzca las relaciones

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 - \hbar\hat{S}_z, \quad (11.85)$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- = \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z. \quad (11.86)$$

Combinando estas ecuaciones y la suposición  $b_M = b_m + n\hbar$ , demuestre que  $b_m = -n\hbar/2$ .

4. Demuestre las relaciones

$$\hat{S}_+ |sm_s\rangle = \hbar\sqrt{(s+m_s+1)(s-m_s)} |s, m_s+1\rangle, \quad (11.87)$$

$$\hat{S}_- |sm_s\rangle = \hbar\sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)} |s, m_s-1\rangle, \quad (11.88)$$

y muestre, a partir de estas expresiones, la representación matricial de  $S_x$  y  $S_y$ .

5. Utilizando las ecuaciones de eigenvalores (11.8), muestre que la representación matricial de
- $S_z$
- es

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.89)$$



6. Demuestre que las componentes del espín anticonmutan, es decir,

$$\widehat{S}_i \widehat{S}_j + \widehat{S}_j \widehat{S}_i = 0, \quad \text{para } i, j = x, y, z, \quad (11.90)$$

y además

$$2S_i S_j = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k. \quad (11.91)$$

7. Si  $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{S}/\hbar$ , demuestre que las representaciones matriciales de sus componentes son las matrices de Pauli  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ .
8. Demuestre las siguiente identidades

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}, \quad (11.92)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla + \mathbf{f}))(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla + \mathbf{f})) = (\nabla + \mathbf{f})(\nabla + \mathbf{f})I_2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{f}). \quad (11.93)$$

9. Demuestre la identidad

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \widehat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \widehat{\mathbf{p}}) = \widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{p}} I_2. \quad (11.94)$$

Y demuestre también que, si hay campo magnético, entonces

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \widehat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \widehat{\mathbf{p}}) \rightarrow \widehat{\mathbf{p}}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{B} \cdot \widehat{\mathbf{L}} + \frac{q^2 B^2}{c^2} \frac{1}{4} (x^2 + y^2). \quad (11.95)$$