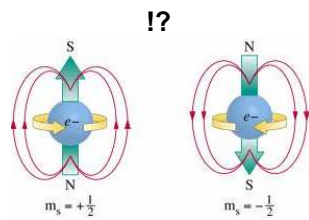


## Spin



## Momento Magnetico y spin

### Momento magnetico

Las líneas del hidrogeno observadas con alta precision muestran una separacion

En el hidrogeno fueron descritas por sommerfeld usando relatividad pero solo funciona alli

Lo mismo ocurre para todos los elementos pero no pueden ser descriptos como en el caso del Hidrogeno.

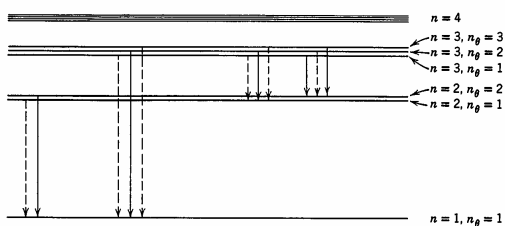


Figure 5-13. The fine structure splitting of some energy levels of the hydrogen atom. The splitting is greatly exaggerated. The possible transitions between the levels are indicated by solid arrows.

En 1925 Pauli propuso la adición de otro número cuántico a  $n, m, l$  que solo tomase solo 2 valores

Los números cuánticos surgieron por la satisfacción de condiciones de contorno

El spin que estaba asociado al tiempo en una teoría relativista

En el mismo año Goudsmit y Uhlenbeck sugirieron que ese número cuántico la componente  $z$ ,  $m_s$ , de un momento angular intrínseco del electrón

Con esto se explicaba el desdoblamiento y también los resultados de un Experimento en 1922 por Stern & Gerlach

A esto lo llamamos spin

Si el numero cuantico de spin es  $s$  debera tener  $2s + 1$  componentes segun  $z$  en analogia con  $l$

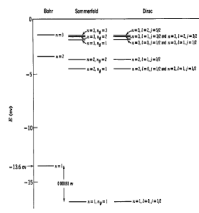


Figure 11-12. Energy levels of the hydrogen atom according to Bohr, Sommerfeld, and Dirac. The splittings from the Bohr energy levels are exaggerated by a factor of 1000.

### Momento magnetico

Cuando un sistema cargado rota, aparece un momento magnetico si rota entonces el momento angular es

$$L = Mv'R$$

(sea una particula de masa  $M$ , Carga  $q$  que se mueve en un Circulo de radio  $R$ )

En la direccion (para cargas positivas)

$$R \times v$$

El momento magnetico de un loop de corriente es el producto de la corriente por el area

Si la trayectoria es un circulo la corriente es (para carga  $q$  y frecuencia  $\nu = v'/2\pi R$ )  $i = q\nu = q/T \Rightarrow$

$$\mu = q \frac{v'}{2\pi R} \pi R^2 = \frac{1}{2} qv'R = \frac{q}{2M} Mv'R = \frac{q}{2M} L$$

$$\mu = \frac{q}{2M} \mathbf{L}$$

$$\mu = iA \quad \mu = q_m \delta$$

Con  $q_m =$  la fuerza magnetica  
O polo magnetico

Para un sistema de particulas

$$\mu = \sum_i \frac{q_i}{2M_i} \mathbf{L}_i$$

Que vale para todo loop (no solo circular)

Para el caso del atomo de Hidrogeno el modulo del momento magnetico es

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)}$$

y la correspondiente componente z

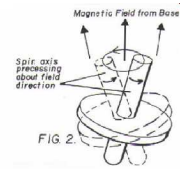
$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m$$

donde el - viene del signo de la carga del electron

(como la carga es negativa el momento magnetico apunta en sentido contrario Al momento angular)

$\frac{e\hbar}{2m_e}$  es el magneton de Bohr y vale  $9.27 \times 10^{-28}$  joule/gauss

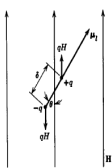
Ojo con las unidades aquí SI en cgs aparece un 1/c



Si un dipolo se encuentra en un campo externo resulta que aparecera un torque

$$\Gamma = \mu \times H$$

Que trata de alinear al dipolo con el campo, si un "imancito" esta rotando Alrededor de su eje el efecto es una precesión.



Para rotarlo segun el angulo theta hay que hacer un trabajo

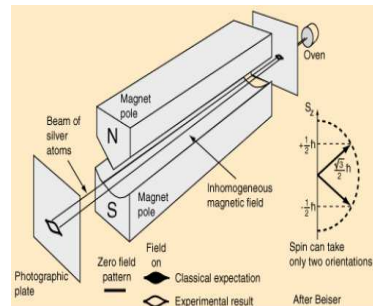
$$dW = \Gamma d\theta = \mu H \sin\theta d\theta = d(-\mu H \cos\theta) = d(-\mu \cdot H)$$

Como el trabajo me da la variacion de energia potencial, si lo hacemos desde  $\theta = 0$  (perpendicularal campo)  $\Rightarrow$  con H segun z

$$U = -\mu \cdot H$$

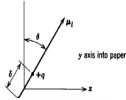
Con el trabajo igual a la variacion de energia que tomamos 0 cuando perpendicular

### Experimento de Stern-Gerlach



En 1922 Stern y Gerlach hicieron el experimento de hacer pasar un haz de átomos de Plata por un campo magnético inhomogéneo  $\Rightarrow H_z(z)$

En este caso no solo hay torque sino que también debido a la inhomogeneidad aparece una fuerza neta en algún sentido



Entonces las fuerzas en los "extremos" será diferente pues, como el campo es inhomogéneo, luego la componente según  $z$  en los extremos del "iman" son

$$H(z)_{+q} = H_0 + \frac{\partial}{\partial x} H_z x + \frac{\partial}{\partial z} H_z z$$

$$H(z)_{-q} = H_0 + \frac{\partial}{\partial x} H_z (-x) + \frac{\partial}{\partial z} H_z (-z)$$

Según la figura

$$x = \frac{\delta}{2} \sin \theta$$

$$z = \frac{\delta}{2} \cos \theta$$

Calculamos la fuerza

$$F_z = q_m [H(z)_{+q} - H(z)_{-q}]$$

$$= q_m \left[ \frac{\partial}{\partial x} H_z \delta \sin \theta + \frac{\partial}{\partial z} H_z \delta \cos \theta \right]$$

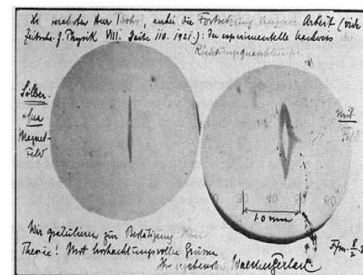
$$= \left[ \frac{\partial}{\partial x} H_z \mu_x + \frac{\partial}{\partial z} H_z \mu_z \right] \Rightarrow$$

$$\langle F_z \rangle = \frac{\partial}{\partial x} H_z \langle \mu_x \rangle + \frac{\partial}{\partial z} H_z \langle \mu_z \rangle$$

$$= \frac{\partial}{\partial z} H_z \mu_z$$

Clásicamente no hay restricción en los valores de  $\mu$  luego debería dar una mancha

Pero se obtuvieron 2 manchas (ver figura)



Por otro lado...

Cuánticamente esperamos que  $\mu_z$  tenga  $2l + 1$  valores (correspondiente a los posibles valores de  $m$ )

Atomo de plata

Cantidad de protones y electrones : 47

Cantidad de neutrones 61

Masa 107.8682 amu



Pero como  $l = 0, 1, 2, 3 \Rightarrow$

$l = 0 \Rightarrow 1$  línea correspondiente a no deflexion

$l = 1 \Rightarrow 3$  líneas pues  $m = -1, 0, 1$

En 1927 Phipps y Taylor obtuvieron lo mismo para hidrogeno en el fundamental que tiene  $l = 0$  pero nuevamente obtuvieron "2 líneas"

Extendiendo lo que sabemos de momento angular pensamos entonces que el electron tiene un momento angular intrinseco tal que su componente  $z$  es  $\frac{1}{2}\hbar$  o  $-\frac{1}{2}\hbar$ , o sea el modulo de este momento angular debe ser

$$\sqrt{s(s+1)}\hbar, \text{ con } s = \frac{1}{2} \Rightarrow$$
$$s_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$$

Esto se llama "cuantizacion espacial"

Atencion : no pensar en una pelotita girando!

La fundamentacion del spin surge de la teoria relativista de Dirac.

### Operadores de spin y autofunciones

Tenemos que completar la teoria de Schroedinger agregando el spin pues no hay modo de obtenerlo de ella

Definimos entonces el  $\hat{S}$ , pero como el spin no tiene contraparte clasica no podemos desarrollarlo en coordenadas 3D, pero sabemos sus propiedades

Si asociamos dos terminos de funcion de onda  $\rightarrow$

$$\alpha \Leftrightarrow m_s = \frac{1}{2}$$

$\gamma$

$$\beta \Leftrightarrow m_s = -\frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \alpha &= \frac{1}{2} \hbar \alpha \\ \hat{S}_z \beta &= -\frac{1}{2} \hbar \beta \\ \hat{S}^2 \alpha &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar^2 \alpha \\ \hat{S}^2 \beta &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar^2 \beta\end{aligned}$$

Hay ahora dos funciones de onda para el estado fundamental del

hidrogeno que sera autofuncion de  $\hat{E}$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{S}_z$ .

Para incorporar el spin en la funcion de onda hacemos, por ejemplo

$$\psi_{100\frac{1}{2}} = C_{100} R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) \alpha$$

$$\psi_{100-\frac{1}{2}} = C_{100} R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) \beta$$

Y entonces el gs se escribe como

$$\psi = C \psi_{100\frac{1}{2}} + C' \psi_{100-\frac{1}{2}}$$

Para una mezcla "random"  $C=C'=1/\sqrt{2}$  Pues la proba de  $\frac{1}{2}$  es  $|C|^2 = \frac{1}{2}$

Es interesante ver entonces que si tenemos un hidrogeno en el estado  $n=2$  y con  $l=1$

Como  $l=1$  hay 3 autofunciones de  $\hat{L}^2$  y de  $\hat{L}_z$  con autovalores  $m=1, 0, -1$

Como ahora cada una puede tener las autofunciones  $\alpha$  o  $\beta$  del spin

Resulta un total de 6 combinaciones  $\Rightarrow$

$$\begin{aligned}f_{1,1}(\theta) \exp(i\phi) \alpha \\ f_{1,0}(\theta) \exp(0) \alpha \\ f_{1,-1}(\theta) \exp(-i\phi) \alpha\end{aligned}$$

y las correspondientes con  $\beta$

3

### Suma de Momentos angulares

Ahora nos encontramos con la situacion que tenemos 2 momentos angulares para los electrones, introducimos entonces

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

El momento angular resultante  $\hat{J}$  deberia satisfacer las condiciones para el momento angular visto desde el punto de vista cuantico, esperamos entonces que

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= j(j+1) \hbar^2 \Rightarrow \\ J &= \sqrt{j(j+1)} \hbar\end{aligned}$$

con  $j$  un numero cuantico

Esperamos tambien que para las proyecciones sobre  $z$

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

cuyos autovalores seran

$$m_j = m_l + m_s$$

Tendríamos entonces 2 valores para  $m_s$  y  $(2l + 1)$  para  $m_l$

$$m_j|_{\max} = l + \frac{1}{2}$$

ademas

$$|L + S| \geq ||L| - |S|| \Rightarrow$$

$$\sqrt{j(j+1)} \geq \left| \sqrt{l(l+1)} - \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} \right|$$

Que solo es satisfecha por

$$j = \left(l + \frac{1}{2}\right), y \left(l - \frac{1}{2}\right)$$

un ejemplo

		$m_l$ para $l = 2$				
		2	1	0	-1	-2
$m_s$ para	$s = \frac{1}{2}$	$2\frac{1}{2}$	$1\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-1\frac{1}{2}$
	$s = -\frac{1}{2}$	$1\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-1\frac{1}{2}$	$-2\frac{1}{2}$

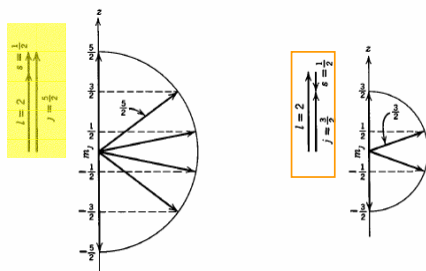


Figure 11-11. Vector addition diagrams for the quantum numbers  $l = 2, s = \frac{1}{2}$ .

Generalizando lo anterior a todo valor de  $l$ , los posibles valores de  $j$  son:

$$j = l + \frac{1}{2}$$

$$j = l - \frac{1}{2}$$

Entonces :

Si  $J_1$  es un momento angular y  $J_2$  es otro , el momento angular resultante es

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

tiene el valor

$$\hbar\sqrt{j(j+1)}$$

donde  $j$  puede tener los valores

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

Por ejemplo : sean dos electrones con  $j_1 = \frac{3}{2}$  y otro con  $j_2 = \frac{5}{2}$  entonces

$$j_1 + j_2 = 4 \Rightarrow \hbar\sqrt{j(j+1)} = \hbar\sqrt{20}$$

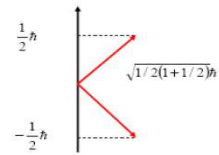
$$j_1 + j_2 = 3 \Rightarrow \hbar\sqrt{j(j+1)} = \hbar\sqrt{12}$$

$$j_1 + j_2 = 2 \Rightarrow \hbar\sqrt{j(j+1)} = \hbar\sqrt{6}$$

$$j_1 + j_2 = 1 \Rightarrow \hbar\sqrt{j(j+1)} = \hbar\sqrt{2}$$

### Vision Semiclasica de spin-orbita

La imagen que tenemos del spin en terminos de lo tratado anteriormente



Supongamos que tenemos hidrogenos en el estado fundamental  
 $\Rightarrow n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow j = 1/2$

Esto se denota  $1S_{1/2}$

El siguiente estado es  $\Rightarrow n = 2 \Rightarrow l = 1, 0 \Rightarrow$

$$l = 0 \rightarrow j = 1/2$$

$$l = 1 \rightarrow j = 3/2 \text{ o } 1/2$$

O sea que los estados son

$$(l = 0) \rightarrow 2S_{1/2}$$

$$(l = 1) \rightarrow 2P_{3/2} \text{ o } 2P_{1/2}$$

La teoria relativista de Sommerfeld pronostica una separacion de los estados  $2P$  y  $2S$  del orden de

$$\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \approx \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

Que se llama la constante de estructura fina

Veremos ahora como se separa los niveles  $2P_{3/2}$  y  $2P_{1/2}$  que se llama "efecto spin-orbita"



Usando el modelo de Bohr y sin considerar efectos relativistas (que son despreciables para sistemas mas pesados)

O sea que el "movimiento orbital del electron" genera campo

Figure 11-6. An electron moving in a circular Bohr orbit, as seen by the nucleus.

Figure 11-7. An electron moving in a circular Bohr orbit, as seen by the electron.

El campo magnetico es paralelo al momento angular(MKS)(con  $u$  la rapidez)

$$I = e \left( \frac{u}{2\pi r} \right) \quad (\text{corriente})$$

$$H = 10^{-7} \frac{2\pi I}{r} = 10^{-7} \frac{e u}{r^2}$$

Usando el segundo orbital de Bohr, calculando la rapidez a partir de la energia cinetica del electron

orbital  $\rightarrow 2^2 a_0 = 2.12 \cdot 10^{-10} m$

$$\frac{1}{2} m_e u^2 = 3.4 eV \Rightarrow u = 1.1 \cdot 10^6 m/s$$

$$H = 4 \cdot 10^3 \text{ gauss}$$

Entonces veamos que relacion hay entre el spin y el campo generado en terminos de  $l$

Orientación relativa del Spin y el  $l$

$$\Delta E = -\mu \cdot H = -\mu H \cos \theta$$

(si es paralelo  $\theta=0$  la Energia sera minima)

La energia sera minima cuando  $\mu$  sea paralelo a  $H$

$l=1$

$j = 3/2$  (izquierda) S es "paralelo" a L,  $j = 1/2$  (derecha) S es "antiparalelo" a L (si  $\mu$  en la direccion de S)

Tomando en cuenta que la carga del electron es negativa y por lo tanto su momento magnetico esta opuesto al spin. resulta segun la figura anterior que

$j = 3/2$  (izquierda)  $\mu_s$  es "antiparalelo" a L,  $j = 1/2$  (derecha)  $\mu_s$  es "paralelo" a L

Luego  $j = 1/2$  es de menor energia que  $j = 3/2$

0

$$\Delta E \sim \mu H = \left( 5.79 \cdot 10^{-9} \frac{eV}{\text{gauss}} \right) (4 \cdot 10^3 \text{ gauss})$$
$$= 2.3 \cdot 10^{-5} eV$$

El medido es  $\sim 4.5 \cdot 10^{-5} eV$

