13/9/2016

Espin

Uelenbeck y Goudsmit (1925) descubren experimental// el espin, $\vec{S}$, a Través del momento magnético:

$$\vec{M}_S = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S} \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Pauli lo había predicho en 1924.

Sin pasar por la ecuación de Dirac, se puede presentar con los siguientes postulados:

1) $\vec{S}$ es un momento angular. → satisface las reglas de conmutación:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad , \text{ etc.}$$

2) Nuevo espacio de Hilbert (distinto de $\mathcal{E}_{\vec{r}}$) para los estados de espin: $\mathcal{E}_s$.

$\{S^2, S_z\}$ es un CCOC.

$$S^2 |s,m\rangle = s(s+1)\hbar \ |s,m\rangle$$
$$S_z |s,m\rangle = m\hbar \ |s,m\rangle$$

Sabemos $-s \le m \le s$.

El s es una propiedad fija de cada partícula.

$\mathrm{Dim}(\mathcal{E}_s) = \{2s+1\}$.

3) Espacio total de estados: $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s$

Los observables de espin conmutan con los orbitales

4) Para el electrón: $s = \frac{1}{2}$

13/9/2016

Spin $\frac{1}{2}$

Como caso particular del formalismo de momento angular ya sabemos prácticamente todo.

Como $s = j = \frac{1}{2} \rightarrow$ $\dim(\mathcal{E}_s) = 2$

Tomamos base $\{ |s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle , |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$

de autoestados comunes de S^2 y S_z.

(Se podría trabajar con S_x o S_y en lugar de S_z)

$$\begin{cases} S^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle \\ S_z |\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \end{cases}$$

$\{|+\rangle, |-\rangle\}$ generan todo el espacio de Hilbert $\rightarrow$

$\rightarrow$ relación de clausura:

$$\mathbb{1} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|$$

Podemos expandir todo ket de $\mathcal{E}_s$:

$$|\psi\rangle = |+\rangle\langle+|\psi\rangle + |-\rangle\langle-|\psi\rangle$$

$$= c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$$

Prob. de medir spin $\uparrow$: $|c_+|^2$

$\downarrow$: $|c_-|^2$

Normalización: $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$

13/9/2016

Representación matricial de S_x, S_y, S_z en la base $\{|\pm\rangle\}$

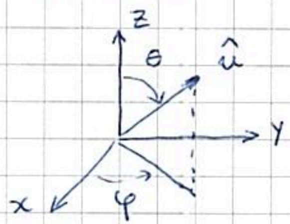
$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Notar también: $S_+ = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Usando S_x, S_y, S_z podemos escribir la matriz de $S_{\hat{u}}$ donde: $\hat{u} = (\operatorname{sen}\theta \cos\varphi, \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\varphi, \cos\theta)$

$$S_{\hat{u}} = \vec{S}\cdot\hat{u} = S_x \operatorname{sen}\theta\cos\varphi + S_y \operatorname{sen}\theta\, s\varphi + S_z\cos\theta$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \operatorname{sen}\theta\, e^{-i\varphi} \\ \operatorname{sen}\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$



Es el observable de proyección de espín en la dirección $\hat{u}$.

Autovalores: $\pm\frac{\hbar}{2}$ y autovectores:

$$|+\rangle_{\hat{u}} = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2}|+\rangle + \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|-\rangle$$

$$|-\rangle_{\hat{u}} = -\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2}|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|-\rangle$$

Ejemplo: $\hat{u} = \hat{x} \to \theta = \frac{\pi}{2},\ \varphi = 0$ | $\hat{u} = \hat{y} \to \theta = \frac{\pi}{2},\ \varphi = \frac{\pi}{2}$

$$\begin{cases} |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ |-\rangle_x = |+\rangle - |-\rangle \end{cases} \qquad \begin{cases} |+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle) \\ |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle) \end{cases}$$

$$\begin{cases} |+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi}|-\rangle \\ |-\rangle_{\hat{u}} = \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}|+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi}|-\rangle \end{cases}$$

Estados de una

Particula de espin 1/2 (IX.c)

Espacio de estados

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s$$

Posibles CCOC:

$$\{X, Y, Z, S^2, S_z\} \quad \{P_x\ P_y\ P_z\ S^2\ S_z\} \quad \{H, L^2, L_z, S^2, S_z\}$$

Trabajemos con las bases $\{|\vec{r}\rangle\}$ y $\{|\varepsilon\rangle\}$.
Escribimos los estados producto:

$$|\vec{r}, \varepsilon\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle$$

Son autoestados del primer CCOC. Por ej:

$$X\,|\vec{r}\,\varepsilon\rangle = x\,|\vec{r}\,\varepsilon\rangle$$

$$S_z\,|\vec{r}\,\varepsilon\rangle = \varepsilon\frac{\hbar}{2}\,|\vec{r}\,\varepsilon\rangle$$

Notar las nuevas formas de ortonormalidad y clausura:

$$\langle\vec{r}\,'\varepsilon'|\vec{r}\,\varepsilon\rangle = \delta_{\varepsilon'\varepsilon}\,\delta(\vec{r}\,'-\vec{r})$$

$$\mathbb{1} = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,|\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon| = \int d^3r\,|\vec{r}+\rangle\langle\vec{r}+| + |\vec{r}-\rangle\langle\vec{r}-|$$

Expansión de un ket $|\psi\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,|\vec{r}\varepsilon\rangle\underbrace{\langle\vec{r}\varepsilon|\psi\rangle}_{\psi_\varepsilon(\vec{r})}$$

$$= \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,\psi_\varepsilon(\vec{r})\,|\vec{r}\varepsilon\rangle$$

$$\psi_\varepsilon(\vec{r}) \to \psi_+(\vec{r}),\ \psi_-(\vec{r})$$

Hay que dar una función de onda para cada componente del espín.

Para operar es útil la notación de espinores:

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix}\psi_+(\vec{r})\\ \psi_-(\vec{r})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\langle\vec{r}+|\psi\rangle\\ \langle\vec{r}-|\psi\rangle\end{pmatrix}$$

El adjunto del espinor es:

$$[\psi]^{\dagger}(\vec{r}) = \big(\langle\psi|\vec{r}+\rangle \quad \langle\psi|\vec{r}-\rangle \big) = \big(\psi_+^*(\vec{r}) \quad \psi_-^*(\vec{r}) \big)$$

Producto escalar:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{1}|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi| \sum_{\varepsilon} \int d^3r \, |\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon| \, |\psi\rangle$$

$$= \sum_{\varepsilon} \int d^3r \, \langle\psi|\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r \sum_{\varepsilon} \langle\psi|\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r \sum_{\varepsilon} \psi_{\varepsilon}^*(\vec{r})\, \psi_{\varepsilon}(\vec{r})$$

$$= \int d^3r \left[\psi_+^*(\vec{r})\psi_+(\vec{r}) + \psi_-^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r}) \right]$$

$$= \int d^3r \, \big(\psi_+^*(\vec{r}) \quad \psi_-^*(\vec{r}) \big) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$= \int d^3r \, [\psi]^{\dagger}(\vec{r}) \, [\psi](\vec{r})$$

<u>Estados producto</u>

Si $\quad |\varphi\rangle = \int d^3r \, \varphi(\vec{r}) \, |\vec{r}\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{r}}$

$\quad |\chi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \in \mathcal{E}_s$

$\Rightarrow |\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$ es un estado producto.

$$\psi_{\pm}(\vec{r}) = \langle\vec{r}\pm|\psi\rangle = \langle\vec{r}|\varphi\rangle\langle\pm|\chi\rangle = \varphi(\vec{r})\, c_{\pm}$$

Espinor $[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r})\, c_+ \\ \varphi(\vec{r})\, c_- \end{pmatrix} = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$

Operadores

Sea $|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon} \int d^3r \; \psi_{\varepsilon}(\vec{r}) \, |\vec{r}\varepsilon\rangle$

$$= \int d^3r \left(\psi_+(\vec{r}) \, |\vec{r}+\rangle + \psi_-(\vec{r}) \, |\vec{r}-\rangle \right)$$

Y recordar que $|\vec{r} \pm\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\pm\rangle$, donde $\psi_{\varepsilon}(\vec{r}) = \langle \vec{r}\varepsilon|\psi\rangle$

Los operadores de espín actúan sobre $|\pm\rangle$.
Por ejemplo:
$S_z |\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \qquad S_x |\mp\rangle = \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle$

Supongamos $|\psi'\rangle = A |\psi\rangle$

Trabajando con espinores, el operador A está representado por una matriz de 2x2:

$$[\psi'](\vec{r}) = [\![A]\!] \, [\psi](\vec{r})$$

$$\cancel{|\psi'\rangle = S_x |\psi\rangle = S_x \sum_{\varepsilon} \int d^3r \, |\vec{r}\varepsilon\rangle \langle \vec{r}\varepsilon|\psi\rangle}$$

$$= \cancel{\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} = \cancel{\sum_{\varepsilon} \int d^3r \, \langle \vec{r}\varepsilon|\psi\rangle \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} |\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle}$$

Supongamos $|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\downarrow\rangle \qquad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

$$S_+ |\psi\rangle = S_+ |\varphi\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

$$= |\varphi\rangle \otimes S_+ |\downarrow\rangle = \hbar \, |\varphi\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$= \hbar \, |\varphi\uparrow\rangle$$

Como espinores:

$$[\Psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi(\vec{r}) \end{pmatrix} \longrightarrow [\Psi'](\vec{r}) = \hbar \begin{bmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ 0 \end{bmatrix}$$

o sea que usamos la matriz de S_+:

$$S_+ [\Psi](\vec{r}) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi(\vec{r}) \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix} = [\Psi'](\vec{r})$$

y otro ejemplo

$$S_z [\Psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi(\vec{r}) \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

y en un estado general:

$$S_z [\Psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ -\Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Operadores orbitales

No tocan la parte de espin $\rightarrow$ son proporcionales a $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$[\![X]\!] = x \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix}$$

$$[\![X]\!] \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\, \Psi_+(\vec{r}) \\ x\, \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$[\![P_x]\!] \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Operadores mixtos

Ej:

$$P_x S_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2i} \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

$$L_z = xP_y - yP_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Probabilidades de medición

Probabilidad de medir posición y espin y obtener $\vec{r}$ y $\uparrow$

$$dP(\vec{r},+) = |\langle \vec{r}+|\psi\rangle|^2 d^3r \qquad \mathbb{P} = |\vec{r}+\rangle\langle\vec{r}+|$$

$$= |\psi_+(\vec{r})|^2 d^3r \qquad \langle\psi|\mathbb{P}|\psi\rangle = \langle\psi|\vec{r}+\rangle\langle\vec{r}+|\psi\rangle$$

$$= |\langle\vec{r}+|\psi\rangle|^2 = \rho_+(\vec{r})$$

Probabilidad de estar en $\vec{r}$ con cualquier espin?

$$dP(\vec{r}) = \left(|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2\right) d^3r \quad \circledast$$

Probabilidad de tener espin $\uparrow$ total?

↳ y cualquier posición.

$$P_\uparrow = \int d^3r\, |\psi_+(\vec{r})|^2 \qquad \mathbb{P} = \int d^3r\, |\vec{r}+\rangle\langle\vec{r}+|$$

Valor medio de A

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \int d^3r\, [\psi]^\dagger(\vec{r})\, \mathbb{[}A\mathbb{]}\, [\varphi](\vec{r})$$

$\uparrow$ matriz de 2x2

$\circledast$ $\mathbb{P} = \sum_\varepsilon |\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon|$

$$\langle\psi|\mathbb{P}|\psi\rangle = \sum_\varepsilon \langle\psi|\vec{r}\varepsilon\rangle\langle\vec{r}\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= \sum_\varepsilon |\langle\vec{r}\varepsilon|\psi\rangle|^2$$

$$= \sum_\varepsilon |\psi_\varepsilon(\vec{r})|^2$$

$$= |\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2$$