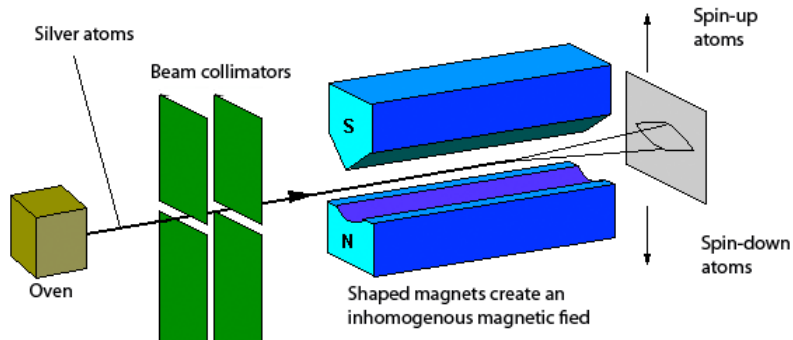
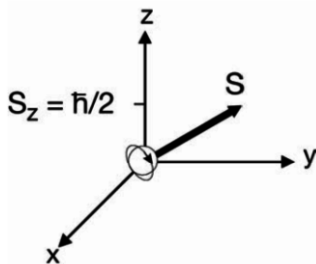
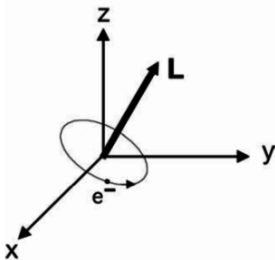


## El experimento de Stern-Gerlach(1922)



## Evidencias del spin electrónico

- 1 (1921) dispersión Compton: sugirió que el electrón es la partícula magnética elemental
- 2 (1922) experimento Stern-Gerlach: pasando un haz de átomos de plata ( $4d^{10}5s^1$ ) a través de un campo magnético inhomogéneo se observó su división en dos haces
- 3 (1925) Uhlenbeck y Goudsmit: demostraron que se trataba de dos estados de momento angular. El electrón tiene momento angular intrínseco, momento angular de **SPIN**
- 4 (1925) Principio de exclusión de Pauli: antisimetría de la función de onda, como consecuencia no más de dos electrones por orbital, o, dos electrones no pueden tener todos sus números cuánticos iguales. Número cuántico de spin:  $m_s$
- 5 (1928) Dirac: desarrolló la teoría cuántica relativista, derivando de ella el momento angular de spin electrónico



## Operadores

Los operadores de momento angular de spin electrónico se definen de forma análoga a los operadores de momento angular orbital, con la salvedad de que sólo hay dos estados de spin:

$$\begin{aligned}\widehat{L}_z \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi) &= m\hbar \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi) \\ \widehat{L}^2 \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi) &= \ell(\ell + 1)\hbar^2 \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi)\end{aligned}$$

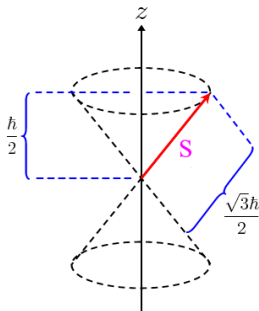
$$\begin{aligned}m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell; & \ell &\geq |m| \\ m &= -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, +\ell - 1, +\ell\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\widehat{S}_z \cdot \alpha(\sigma) &= m_s^\alpha \hbar \cdot \alpha(\sigma) \\ \widehat{S}_z \cdot \beta(\sigma) &= m_s^\beta \hbar \cdot \beta(\sigma) \\ \widehat{S}^2 \cdot \alpha(\sigma) &= s(s + 1)\hbar^2 \cdot \alpha(\sigma) \\ \widehat{S}^2 \cdot \beta(\sigma) &= s(s + 1)\hbar^2 \cdot \beta(\sigma)\end{aligned}$$

$$m_s^\alpha = \frac{1}{2}, \quad m_s^\beta = -\frac{1}{2}, \quad s = \frac{1}{2} \text{ (siempre)}$$

Las autofunciones de spin son ortonormales:

$$\begin{aligned}\int \alpha(\sigma)\beta(\sigma) d\sigma &= \int \beta(\sigma)\alpha(\sigma) d\sigma = 0 \\ \int \alpha(\sigma)\alpha(\sigma) d\sigma &= \int \beta(\sigma)\beta(\sigma) d\sigma = 1\end{aligned}$$



momento magnético orbital	momento magnético de spin
$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$	$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e} g \vec{S}$
$ \vec{\mu}_L  = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\ell(\ell + 1)}$	$ \vec{\mu}_S  = -\frac{e\hbar}{2m_e} g \sqrt{s(s + 1)}$
$\mu_{Lz} = -\frac{e\hbar}{2m_e} m$	$\mu_{Sz} = -\frac{e\hbar}{2m_e} g m_s$

donde el factor g electrónico es probablemente la constante universal más exacta conocida  $g = 2.0023193043625635$  con un error de  $1.7 \cdot 10^{-13}$

## Operadores ascendente y descendente

Para determinar los valores propios de operadores de momento angular de spin electrónico son muy útiles los operadores ascendente y descendente que se definen de forma similar a los correspondientes operadores de momento angular orbital:

$$\widehat{S}_+ = \widehat{S}_x + i\widehat{S}_y$$

$$\widehat{S}_- = \widehat{S}_x - i\widehat{S}_y$$

y, teniendo en cuenta que las relaciones de conmutación son equivalentes a las del momento angular orbital, al igual que para el momento angular orbital se obtiene:

### operadores de spin

$$\begin{aligned}\widehat{S}^2 &= \widehat{S}_+ \widehat{S}_- - \hbar \widehat{S}_z + \widehat{S}_z^2 \\ \widehat{S}^2 &= \widehat{S}_- \widehat{S}_+ + \hbar \widehat{S}_z + \widehat{S}_z^2\end{aligned}$$

Finalmente, la función de onda electrónica total tiene tanto una parte espacial como otra parte de spin. Cada parte está normalizada de manera que la función total también está normalizada:

$$\begin{aligned}\Psi(r, \theta, \phi, \sigma) &= \psi(r, \theta, \phi) \cdot \alpha(\sigma) \\ \Psi(r, \theta, \phi, \sigma) &= \psi(r, \theta, \phi) \cdot \beta(\sigma)\end{aligned}$$

por ejemplo, para un átomo Hidrogenoide en su estado fundamental la función de onda total (en unidades atómicas) será:

$$\psi_{100\frac{1}{2}} = \left[ \frac{Z^3}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-Zr} \alpha$$

$$\psi_{100-\frac{1}{2}} = \left[ \frac{Z^3}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-Zr} \beta$$

## Interacción Spin-Orbita

Hemos visto que para el Hidrógeno el operador Hamiltoniano es estrictamente electrostático sin otro tipo de interacciones y esto proporciona una buena descripción del espectro. Sin embargo, hay discrepancias. Por ejemplo, si se examina con mucha precisión la transición  $n = 2$  a  $n = 1$  hay dos líneas muy juntas (un doblete). Esto es debido a la interacción entre el momento magnético del momento angular orbital y el momento magnético del momento angular de spin, justo como dos imanes interactúan entre si. La energía de esta interacción debe introducirse en el Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S}$$

En el átomo de Hidrógeno, este término supone una muy pequeña diferencia de energía, además de no poder resolver de forma analítica la ecuación de Schrödinger y también  $\hat{L}^2$  y  $\hat{S}^2$  ya no conmutan con el Hamiltoniano, por tanto no se conservan, sino sólo el momento angular total  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ . La energía depende ahora de  $n$  y  $j$ .

Como el valor de  $s = \frac{1}{2}$  y el valor de  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  los valores de  $j$  corresponden a la suma de los momentos angulares,  $j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|$  (ver tabla)

$l = 0$	2 states	
	$m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$j = \frac{1}{2}$
$l = 1$	6 states	
	$m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$	$j = \frac{3}{2}$
	$m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$j = \frac{1}{2}$
$l = 2$	10 states	
	$m_j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}$	$j = \frac{5}{2}$
	$m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$	$j = \frac{3}{2}$
$l = 3$	14 states	
	$m_j = \frac{7}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}, -\frac{7}{2}$	$j = \frac{7}{2}$
	$m_j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}$	$j = \frac{5}{2}$

Los valores experimentales pueden verse en las tablas del NIST ([https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels\\_form.html](https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html))

Orbital angular momentum

$$\hat{L} (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z),$$

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)},$$

$$l = 0, 1, 2, \dots,$$

$$L_z = m\hbar,$$

*m*- magnetic number,

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_{x_j}] = 0, \quad x_j = x, y, z,$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z,$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y,$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x,$$

Spin angular momentum

$$\hat{S} (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z),$$

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)},$$

$$s = 1/2,$$

$$S_z = m_s\hbar,$$

*m<sub>s</sub>*- magnetic spin number

$$m_s = \pm 1/2$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2,$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_{x_j}] = 0, \quad x_j = x, y, z,$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z,$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y,$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x.$$