L'operador moment angular d'espín

Josep Planelles

December 28, 2011

En la majoria de les fonts bibliogràfiques l'operador d'espín i les seues funcions pròpies α i β apareixen en forma simbòlica, cosa que contrasta amb el moment angular orbital i les seues autofuncions que se presenten en la seua representació coordenada que les fa més accessibles a la vegada que proporciona formalismes no heurístics de manipulació. En aquestes notes revisarem de forma breu com s'origina l'operador d'espín amb la finalitat d'obtenir una realització concreta i intuitiva per a la seua manipulació.

Comencem recordant que en teoria relativista l'energia cinètica d'una partícula és $E = mc^2$. Addicionalment, aquesta partícula podrà tenir un potencial $V(r)$ en ocupar una determinada posició en un camp potencial V. El moment lineal és $p = mv$. Escrivim:

$$\left.\begin{array}{r} E^2 = m^2c^2 \\ p^2c^2 = m^2v^2c^2 \end{array}\right\} \to E^2 - p^2c^2 = m^2c^2(c^2 - v^2) = \frac{m_0^2c^4}{c^2 - v^2}(c^2 - v^2) \Longrightarrow E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4 \tag{1}$$

Aleshores $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$. Dirac va plantejar escriure que $E = \alpha pc + \beta m_0c^2$. Aquesta igualtat és falsa si α i β són números, però no ho és si són matrius. La menor dimensió de les matrius que permeten aquesta linearització en la fórmula de l'energia és 4x4. En particular, si escrivim

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \text{amb} \quad \vec{\sigma} = \vec{\imath}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \vec{\jmath}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \vec{k}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

podem comprovar que $[\alpha pc + \beta m_0c^2]^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. En efecte, tenim que:

$$[\alpha pc + \beta m_0c^2]^2 = (\alpha p)^2c^2 + \beta^2m_0^2c^4 + (\alpha p\beta + \beta\alpha p)m_0c^2.$$

Com $\alpha p = \alpha_xp_x + \alpha_yp_y + \alpha_zp_z$ tenim que:

$$\alpha p\beta + \beta\alpha p = (\alpha_x\beta + \beta\alpha_x)p_x + (\alpha_y\beta + \beta\alpha_y)p_y + (\alpha_z\beta + \beta\alpha_z)p_z \tag{3}$$

amb

$$\alpha_x\beta + \beta\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ -\sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

amb la qual cosa el tercer terme és zero. Tanmateix, és immediat comprovar que $\beta^2 = I_{4\text{x}4}$.

Finalment tenim el terme:

$$\alpha_x^2p_x^2 + (\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x)p_xp_y + (\alpha_x\alpha_z + \alpha_z\alpha_x)p_xp_z + \cdots + \alpha_z^2p_z^2 \tag{5}$$

amb

$$\alpha_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & 0 \\ 0 & \sigma_x^2 \end{pmatrix} \quad ; \quad \text{on } \sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

en conseqüència $\alpha_x^2 = I_{4\text{x}4}$.

Considerem ara els termes creuats:

$$\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x \end{pmatrix} \tag{7}$$

Per una altra banda,

$$\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i-i & 0 \\ 0 & i-i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

amb la qual cosa $\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = 0$, de manera que $(\alpha p)^2 = p^2 I_{4\text{x}4}$.

Per tant podem escriure que $E = \vec{\alpha}\vec{p}c + \beta m_0 c^2 + V(r)$ i aleshores escriure l'equació d'autovalors de Dirac en la forma:

$$[\alpha\hat{p}c + \beta m_0 c^2 + V(r)]\Psi = E\Psi \quad \text{on} \quad \Psi = \begin{pmatrix} f_1(r) \\ f_2(r) \\ f_3(r) \\ f_4(r) \end{pmatrix}. \tag{9}$$

La forma en blocs de les matrius α i β suggereix escriure $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$, on ψ_A i ψ_B són vectors columna de dos components. Aleshores rescrivim l'equació d'autovalors:

$$\begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \hat{p}\, c \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} m_0 c^2 \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} V(r) \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \tag{10}$$

efectuant el producte matricial trobem que:

$$\begin{cases} c\sigma\hat{p}\psi_B + V(r)\psi_A = (E - m_0c^2)\psi_A = \tilde{E}\psi_A \\ c\sigma\hat{p}\psi_A - m_0c^2\psi_B + V(r)\psi_B = E\psi_B \longrightarrow \psi_B = (2m_0c^2 + \tilde{E} - V)^{-1}c\sigma\hat{p}\psi_A \end{cases} \tag{11}$$

Considerem ara el terme:

$$\frac{1}{2m_0c^2 + \tilde{E} - V}\, c = \frac{\frac{1}{2m_0c^2}}{1 + \frac{\tilde{E}-V}{2m_0c^2}}\, c = \frac{1}{2m_0c}\left(1 - \frac{\tilde{E} - V(r)}{2m_0c^2} + \dots\right) \approx \frac{1}{2m_0c} \tag{12}$$

Amb aquesta aproximació severa tenim que:

$$\frac{1}{2m_0}(\sigma\hat{p})^2\psi_A + V(r)\psi_A = \tilde{E}\psi_A, \;\; \text{on} \;\; \sigma\hat{p} = \sum_{x,y,z}\sigma_i\hat{p}_i = \begin{pmatrix} \hat{p}_z & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & -\hat{p}_z \end{pmatrix} \;\; \text{amb} \;\; \hat{p}_\pm = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y. \tag{13}$$

És immediat comprovar que $(\sigma\hat{p})^2 = \hat{p}^2\, I_{2\text{x}2}$ i l'equació d'autovalors queda:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m_0}\psi_A + V(r)\psi_A = \tilde{E}\psi_A \;\; \text{on} \;\; \psi_A = \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r) \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ g(r) \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Podem escriure ara de manera simbòlica $\psi_A = f(r)\alpha + g(r)\beta$ on $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ i $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Veiem doncs que l'equació d'autovalors obtinguda equival a l'equació no relativista de Schrödinger.

Si no fem una aproximació tan severa del terme aproximat en l'eq. 12 i considerem

$$\frac{1}{2m_0c^2 + \tilde{E} - V}\, c \approx \frac{1}{2m_0c}\left(1 - \frac{\tilde{E} - V(r)}{2m_0c^2}\right), \tag{15}$$

apareix en l'equació d'autovalors el terme adicional $-\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\sigma\hat{p} \times \nabla V)$ que anomenem d'espín-òrbita perquè si $V(r) = -\frac{1}{r}$, aleshores $\nabla V = \frac{\vec{r}}{r^3}$ i com $\vec{p} \times \vec{r} = -\vec{L}$ aquest terme pren la forma $H_{SOC} = \xi\hat{L}\hat{S}$, on hem anomenat $\hat{S} = \frac{1}{2}\sigma$. Aquest operador d'espín actua sobre l'espinor ψ_A de manera matricial. Per exemple,

$$\hat{S}_x\psi_A = \frac{1}{2}\sigma_x\psi_A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} g(r) \\ f(r) \end{pmatrix}.$$

L'operador $\hat{S}^2 = \frac{1}{2}\sigma\frac{1}{2}\sigma = \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2)$. És immediat comprovar que $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I_{2\text{x}2}$. Aleshores $\hat{S}^2$ és diagonal: $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}I_{2\text{x}2}$.

Els operadors escalars, com ara $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, etc. són operadors diagonals: $\hat{H}_0 I_{2x2}$, $\hat{L}^2 I_{2x2}$, etc.

Calculem ara un operador mixt, com ara $2\hat{L}\hat{S} = 2(\hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z)$:

$$2\hat{L}\hat{S} = \hat{L}_x\sigma_x + \hat{L}_y\sigma_y + \hat{L}_z\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & \hat{L}_x \\ \hat{L}_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{L}_y \\ i\hat{L}_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{L}_z & 0 \\ 0 & -\hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & -\hat{L}_z \end{pmatrix} \tag{16}$$

amb $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$.

Anàlogament l'operador $\widehat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \widehat{L}^2 + \widehat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}$ queda:

$$\widehat{J}^2 = \widehat{L}^2 I_{2x2} + \frac{3}{4} I_{2x2} + \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & -\hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \tag{17}$$

Fixem-nos que els espinors $\begin{pmatrix} Y_{LM} \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{LM} \end{pmatrix}$ són propis dels operadors $\hat{H}_0$, $\widehat{L}^2$, $\hat{L}_z$, $\widehat{S}^2$, $\hat{S}_z$. També ho són de $\hat{J}_z$:

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z = \begin{pmatrix} \hat{L}_z + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \hat{L}_z - \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

En efecte,

$$\hat{J}_z \begin{pmatrix} Y_{LM} \\ 0 \end{pmatrix} = (M + \frac{1}{2}) \begin{pmatrix} Y_{LM} \\ 0 \end{pmatrix},$$

però no ho són de $\widehat{J}^2$. Els autovectors de $\widehat{J}^2$ han de ser de la forma $\begin{pmatrix} a\,Y_{LM} \\ b\,Y_{L(M+1)} \end{pmatrix}$. En efecte:

$$\widehat{J}^2 \begin{pmatrix} a\,Y_{LM} \\ \\ b\,Y_{L(M+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \{[L(L+1) + \frac{3}{4} + M]\,a + b\,\sqrt{L(L+1) - (M+1)M}\,\}Y_{LM} \\ \\ \{\sqrt{L(L+1) - M(M+1)}\,a + b\,[L(L+1) + \frac{3}{4} - M - 1]\}Y_{L(M+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\,Y_{LM} \\ \\ B\,Y_{L(M+1)} \end{pmatrix} \tag{18}$$

Els quoficients a i b han de ser tals que $\frac{a}{b} = \frac{A}{B}$.

A manera d'exercici comporvarem que la base de funcions de Bloch per a forats de valència:

$$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\alpha, \frac{1}{\sqrt{6}}(x+iy)\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}z\alpha, -\frac{1}{\sqrt{6}}(x-iy)\alpha - \sqrt{\frac{2}{3}}z\beta, \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)\beta\}$$

és pròpia de $\widehat{J}^2$. Abans però farem dos aclariments importants respecte de notmalitzacions i fases. La primera és que $p_\pm = (x \pm iy)$ no està normalitzat. Cal afegir una constant $1/\sqrt{2}$. Aleshores escrivim $Y_{10} \equiv z$, $Y_{11} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)$, $Y_{1,-1} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)$. Fixem-nos en la fase que hem introduit en la definició de Y_{11}. Aquesta és consistent amb el criteri de Condon-Shortley $Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$.

Amb aquestes consideracions[1] podem rescriure la base de valència:

$$\{-Y_{11}\alpha, -\frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{11}\beta + \sqrt{2}Y_{10}\alpha), \frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{1,-1}\alpha + \sqrt{2}Y_{10}\beta), Y_{1,-1}\beta\}$$

sobre la qual ja podem aplicar els operadors $\widehat{L}^2$, $\hat{L}_z$, $\hat{L}_\pm$.

Procedim doncs a obtenir tota la base a partir de $|3/2, 3/2\rangle$ amb el concurs de $\hat{J}_-$ i a comprovar que és pròpia de $\widehat{J}^2$:

$$\hat{J}_- = \hat{L}_- + \hat{S}_- = L_-\,I_{2x2} + \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 1 & \hat{L}_- \end{pmatrix} \tag{19}$$

[1] Sense introduir aquesta fase en Y_{11} semblaria que $|3/2, 1/2\rangle$ no seria pròpia der $\widehat{J}^2$ i no podria obternirse des de $|3/2, 3/2\rangle$ amb el concurs de $\hat{J}_-$.

$$\hat{J}_-(-Y_{11}\alpha) = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 1 & \hat{L}_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2}\,Y_{10} \\ -Y_{11} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{normalització}} -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{10} \\ Y_{11} \end{pmatrix} \tag{20}$$

$$\hat{J}_-[-\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}Y_{10}\alpha + Y_{11}\beta)] = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 1 & \hat{L}_- \end{pmatrix} (-\frac{1}{\sqrt{3}}) \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{10} \\ Y_{11} \end{pmatrix} = (-\frac{1}{\sqrt{3}}) \begin{pmatrix} 2Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} + \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$\xrightarrow{\text{normalització}} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} \tag{22}$$

$$\hat{J}_-[\frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{1,-1}\alpha + \sqrt{2}Y_{10}\beta)] = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 1 & \hat{L}_- \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} + 2Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \frac{3}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} \tag{23}$$

$$\xrightarrow{\text{normalització}} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} \tag{24}$$

Comprovem ara que aquesta base és propia de $\widehat{J}^2$

$$\widehat{J}^2 Y_{1,1}\alpha = \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [1(1+1) + \frac{3}{4} + 1]\, Y_{11} + 0 \\ 0 + 0 \end{pmatrix} = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{25}$$

on $15/4 = 3/2(3/2+1)$.

$$\widehat{J}^2 \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{10} \\ Y_{1,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{10} \\ Y_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}[1(1+1) + \frac{3}{4}]\, Y_{10} + \sqrt{2}Y_{10} \\ \sqrt{2}\sqrt{2}Y_{11} + [1(1+1) + \frac{3}{4} - 1]Y_{11} \end{pmatrix} = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{10} \\ Y_{11} \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$\widehat{J}^2 \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [1(1+1) + \frac{3}{4} - 1 + \sqrt{2}\sqrt{2}]\, Y_{1,-1} \\ [\sqrt{2} + \sqrt{2}(1(1+1) + \frac{3}{4} - 0)]Y_{10} \end{pmatrix} = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} Y_{1,-1} \\ \sqrt{2}Y_{10} \end{pmatrix} \tag{27}$$

$$\widehat{J}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 + 0 \\ 0 + [1(1+1) + \frac{3}{4} + 1]\, Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix}. \tag{28}$$