En esta hoja vamos a introducir el concepto de estado de espín y veremos por qué con las ecuaciones cuánticas llegamos a un resultado similar al obtenido con argumentos clásicos. El propósito de este desvío sobre las líneas principales es convencernos de que no estamos haciendo una locura a pesar de que la física clásica no funciona a escala subatómica. Por supuesto, sería demasiado ambicioso que aprendieras mucha física cuántica aquí y daremos por hecho los modelos y las ecuaciones correspondientes, centrándonos sobre todo en los aspectos matemáticos.

Si quieres algo de física cuántica a un nivel asequible, hace tiempo escribí [Cha15]. Si ya sabes algo del tema o deseas profundizar sobre algunos de los conceptos de esta hoja, te pueden resultar interesantes las *lecture notes* del curso [Zwi13].

El estado de espín y su medición. El *estado del espín* de una partícula como el protón o el electrón corresponde a su momento angular clásico. Se representa mediante una combinación lineal compleja no nula de dos posibles estados conocidos como espín arriba (*spin up*) y espín abajo (*spin down*), indicados en física con $|+\rangle$ y $|-\rangle$ o con $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$. Lo único importante es que forman una base ortonormal, por tanto, a todos los efectos, matemáticamente son nombres raros de los vectores de la base canónica de $\mathbb{C}^2$:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad |-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Las combinaciones lineales que difieren en multiplicar por una constante no nula representan el mismo estado de espín y por tanto podemos normalizarlos siempre para que sean vectores unitarios de $\mathbb{C}^2$. Así $3|+\rangle + 4i|-\rangle$ (no normalizado) es lo mismo que $\frac{3}{5}|+\rangle + \frac{4}{5}i|-\rangle$.

Dado un vector $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ unitario que en coordenadas esféricas[1] tiene ángulos θ y φ se le asocia el estado de espín

$$|\vec{n}\rangle = \cos\Big(\frac{\theta}{2}\Big)|+\rangle + e^{i\varphi}\operatorname{sen}\Big(\frac{\theta}{2}\Big)|-\rangle.$$

Por ejemplo si $\vec{n} = (0,0,1)$ se tiene $|\vec{n}\rangle = |+\rangle$ y $|-\vec{n}\rangle = |-\rangle$ mientras que $\vec{n} = (0,1,0)$ conduce a $|\vec{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle$.

El momento angular indica clásicamente un giro por un eje $\vec{n}$ y $|\vec{n}\rangle$ es su representación cuántica. De esta forma $|+\rangle$ significa, en términos clásicos, un giro en sentido positivo por el eje Z y $|-\rangle$ lo mismo con sentido negativo. Para ser más preciso, hay que aclarar que Los estados de espín $|\vec{n}\rangle$ son momentos angulares internos (intrínsecos) de partículas como el electrón y el protón, clásicamente se identificarían con un giro sobre sí mismo. El momento angular correspondiente, por ejemplo, al "giro" de un electrón alrededor de un núcleo atómico ya no se representa con un estado de espín $|\vec{n}\rangle$, no es interno. Para complicar más las cosas, hay partículas, por ejemplo todos los bosones, que cuando tienen momento angular interno,

[1] Sigo la notación habitual: θ es el ángulo con el eje Z, el ángulo polar, y φ el que forma la proyección sobre $z = 0$ con el eje X, el ángulo azimutal. Me extrañaría que hubiera visto otro convenio para las esféricas.

necesitan un $\mathbb{C}^n$ con $n > 2$ para representarlo y por tanto $|\vec{n}\rangle$ tampoco es de utilidad en este caso. Aquí no entraremos en ello porque tendremos en mente solo el electrón y sobre todo el protón, que es el usado en las resonancias magnéticas. En la jerga, el caso de $\mathbb{C}^2$ en el que $|\vec{n}\rangle$ funciona se dice que es el caso $s = 1/2$. Esta s es el espín.

La notación $|\vec{n}\rangle$ no es tan común, es quizá más usual $|\Psi\rangle$ para indicar un estado genérico, típicamente normalizado, porque Ψ o $|\Psi\rangle$ es el nombre usual para las *funciones de onda* que representan estados cuánticos. En el caso del espín, $|\Psi\rangle$ es un vector de $\mathbb{C}^2$, como hemos visto, y en física se indica con $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ el producto escalar de $|\Psi_1\rangle$ y $|\Psi_2\rangle$. Recuerda que el producto escalar en $\mathbb{C}^2$ requiere conjugar el primer vector[2]. Por ejemplo,

$$|\Psi_1\rangle = \frac{2+i}{3}|+\rangle + \frac{2}{3}|-\rangle, \quad |\Psi_2\rangle = \frac{1+i}{2}|+\rangle + \frac{1-i}{2}|-\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = \frac{5-i}{6}.$$

1) Comprueba que $|\Psi_1\rangle$ y $|\Psi_2\rangle$ son estados normalizados y verifica que el cálculo de $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ es correcto.

En física clásica, el momento angular puede tomar cualquier valor pero para el análogo cuántico en partículas como el protón o el electrón, las mediciones solo pueden dar dos resultados y además de manera probabilista, en general. No solo eso, sino que la propia medición altera el estado. Todo esto queda recogido en los dos siguientes puntos que son muy representativos de que la física cuántica es muy rara en comparación con nuestra experiencia cotidiana. El segundo ha sido la manzana de la discordia desde los primeros tiempos de la física cuántica (Einstein y Schrödinger se negaron a creerlo) hasta nuestros días. Lo pongo solo por completar, no tiene relevancia en esta hoja.

1. [Ausencia de determinismo y cuantización] Si medimos un estado de espín (normalizado) $|\Psi\rangle$ en la dirección $\vec{n}$ obtendremos $|\vec{n}\rangle$ con probabilidad $p = \big|\langle\vec{n}|\Psi\rangle\big|^2$ y $|-\vec{n}\rangle$ con probabilidad $1-p$.
2. [Colapso de la función de onda] Después de la medición, el estado $|\Psi\rangle$ se transformará en el que hemos medido.

Por ejemplo, imagina que tienes un montón de electrones con estados de espín aleatorios. Si mides los estados en la dirección del eje Z, la mitad te saldrán $|+\rangle$ y la mitad $|-\rangle$. Digamos que te quedas solo con los segundos y ahora los mides en la dirección del eje Y. Teniendo en cuenta que

$$\langle(0,1,0)|-\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}},$$

[2] Este es el convenio en física y prácticamente en todas las matemáticas excepto en álgebra lineal, donde se conjuga el segundo.

te saldrán en el estado $|(0,1,0)\rangle$ con probabilidad $1/2$. Si te quedas con ellos, con una mentalidad clásica uno diría que son los electrones que tienen espín "abajo" y a la vez "derecha" pero al volver a medir el espín abajo, como $\big|\langle -|(0,1,0)\rangle\big|^2 = 1/2$, solo la mitad de ellos tendrán espín abajo.

2) Comprueba los cálculos de la explicación anterior. Justifica que si $\vec{n}_1$ y $\vec{n}_2$ son vectores unitarios muy próximos, al medir el estado de espín $|\vec{n}_1\rangle$ en la dirección $\vec{n}_2$ es muy probable que obtengamos $|\vec{n}_2\rangle$ y muy poco probable que obtengamos $|-\vec{n}_2\rangle$. Para $\vec{n}_1$ y $\vec{n}_2$ en el plano YZ, halla una fórmula sencilla en términos del ángulo que forman estos vectores, para la probabilidad de que al medir $|\vec{n}_1\rangle$ en la dirección $\vec{n}_2$ se obtenga $|\vec{n}_2\rangle$.

La fórmula en términos del ángulo es válida en general, no solo en el plano YZ, pero es más difícil de probar.

El espín bajo un campo magnético. La evolución de los sistemas cuánticos viene dada por la *ecuación de Schrödinger*. En el caso de estados de espín sometidos a un campo magnético dado por $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$ tiene el aspecto

$$(*) \qquad i\frac{d|\Psi\rangle}{dt} = -\frac{\gamma}{2}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}|\Psi\rangle.$$

La notación es un poco rara para un matemático. Aquí $\vec{\sigma}$ significa el vector cuyas coordenadas son las *matrices de Pauli*:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{y} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Entonces cuando los físicos escriben $\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$, quieren decir:

$$B_1\sigma_1 + B_2\sigma_2 + B_3\sigma_3 = \begin{pmatrix} B_3 & B_1 - iB_2 \\ B_1 + iB_2 & -B_3 \end{pmatrix}.$$

El producto de esta matriz por $|\Psi\rangle$ tiene perfecto sentido ya que $|\Psi\rangle$ está en $\mathbb{C}^2$. Por otro lado, γ es la constante giromagnética de la hoja anterior y, por supuesto, $i = \sqrt{-1}$.

El siguiente ejercicio no es en absoluto una curiosidad dentro de la teoría, la definición "buena" de los estados de espín es como autovectores. A pesar de que apenas haremos referencia a los dos próximos ejercicios, es interesante que los hagas para practicar con la notación.

3) Comprueba que para $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ unitario la matriz $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$ tiene autovalores $+1$ y -1 y que $|\vec{n}\rangle$ y $|-\vec{n}\rangle$ son autovectores respectivos.

Las matrices de Pauli permiten invertir la correspondencia entre vectores unitarios de $\mathbb{R}^3$ y estados de espín.

4) Demuestra que para cualquier $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ unitario

$$\vec{n} = \big(\langle \vec{n}|\Psi_1\rangle, \langle \vec{n}|\Psi_2\rangle, \langle \vec{n}|\Psi_3\rangle\big) \qquad \text{con} \quad \Psi_j = \sigma_j|\vec{n}\rangle.$$

Ahora vamos al objetivo de esta hoja, que es ver en qué sentido hay precesión como la clásica cuando se usan las ecuaciones cuánticas. Consideremos, como en la hoja anterior, el caso $\vec{B} = (0, 0, B)$ con un $\vec{n}_0$ inicial que forma un ángulo α con el eje OZ y ángulo azimutal (el φ de las esféricas) nulo.

5) Resuelve la ecuación de Schrödinger (*) con este $\vec{B}$ y $|\Psi\rangle_{t=0} = |\vec{n}_0\rangle$ como condición inicial.

No te dejes asustar con la notación. El problema es muy sencillo. Visto en $\mathbb{C}^2$, $|\Psi\rangle$ es un vector variable $\big(x(t), y(t)\big)$ y las ecuaciones diferenciales para x e y son triviales.

El vector unitario que gira con frecuencia ν en sentido antihorario alrededor del eje OZ formando un ángulo α con él es:

$$\vec{n}(t) = \big(\cos(2\pi\nu t)\operatorname{sen}\alpha, -\operatorname{sen}(2\pi\nu t)\operatorname{sen}\alpha, \cos\alpha\big).$$

Además se tiene $\vec{n}(0) = \vec{n}_0$.

El siguiente ejercicio muestra finalmente que el estado de espín sufre una precesión con frecuencia igual a la frecuencia de Larmor del caso clásico.

6) Sea $|\Psi\rangle$ la solución del ejercicio anterior. Muestra que si $\nu = \gamma B/(2\pi)$, la frecuencia de Larmor de la hoja anterior, al medir $|\Psi\rangle$ en la dirección $\vec{n}(t)$ se obtiene $|\vec{n}(t)\rangle$ con probabilidad 1.

Después de que te convenzas de que las cuentas han sido realmente muy sencillas, hay algo que suena un poco raro matemáticamente. Parece que considerar solo el caso $\vec{B} = (0, 0, B)$ es tramposo porque el hecho de que σ_3 sea diagonal simplifica todo y no está nada claro que (*) sea invariante por giros ya que girar un vector $\vec{n}$ en $\mathbb{R}^3$ tiene una acción muy complicada sobre el vector $|\vec{n}\rangle$ de $\mathbb{C}^2$ que da el estado de espín.

Puestos en plan desconfiado, también en el caso clásico nos habíamos centrado solo en $\vec{B} = (0, 0, B)$ pero allí las cosas están más claras porque

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \gamma \vec{L} \times \vec{B} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dG\vec{L}}{dt} = \gamma G\vec{L} \times G\vec{B}$$

donde G es la matriz de un giro, es decir, una matriz ortogonal de determinante uno.

7) Demuestra la equivalencia de las fórmulas anteriores. Para ello todo lo que tienes que hacer es justificar $G(\vec{v} \times \vec{w}) = G\vec{v} \times G\vec{w}$. Si no se te ocurre una prueba algebraica, al menos encuentra un argumento geométrico que lo explique.

La justificación de que en el caso cuántico no es trampa tomar $\vec{B} = (0, 0, B)$ es mucho más complicada. Está basada en que si G es el giro de ángulo β alrededor de un vector unitario $\vec{b}$, entonces se tiene

$$(**) \qquad |G\vec{n}\rangle = A_{\vec{b}}(\beta)|\vec{n}\rangle \qquad \text{con} \quad A_{\vec{b}}(\beta) = \cos\big(\frac{\beta}{2}\big)I - i\,\text{sen}\big(\frac{\beta}{2}\big)\vec{b}\cdot\vec{\sigma}.$$

Aquí I es la matriz identidad 2×2. En principio para probar (**) basta aplicar al segundo miembro la fórmula que recuperaba vectores de $\mathbb{R}^3$ a partir de estados de espín y ver que se obtiene $G\vec{n}$, pero eso llevaría a unos cálculos larguísimos. Por eso nos saltaremos la prueba. En física se suele utilizar que basta hacerla cuando β es arbitrariamente pequeño (lo que llaman *rotaciones infinitesimales*) de forma que $\cos(\beta/2) \approx 1$ y $\text{sen}(\beta/2) \approx \beta/2$, pero esto requiere justificaciones y algunos conocimientos para abreviar los cálculos.

8) Muestra que cualquiera que sea $\vec{B} \in \mathbb{R}^3$ de norma $B \neq 0$, la solución de la ecuación de Schrödinger (*) bajo $|\Psi\rangle_{t=0} = |\vec{n}_0\rangle$ es

$$|\Psi\rangle = A_{\vec{b}}(-\gamma Bt)|\vec{n}_0\rangle \qquad \text{con} \quad \vec{b} = \frac{\vec{B}}{B}.$$

Una simplificación que puedes usar en los cálculos es que $(\vec{b}\cdot\vec{\sigma})^2 = I$, ya que habías probado que $\vec{b}\cdot\vec{\sigma}$ tiene autovalores $+1$ y -1.

9) Dando por supuesto (**) explica por qué de aquí se deduce que en todos los casos se produce una precesión alrededor de $\vec{B}$ con frecuencia $\nu = \gamma B/(2\pi)$.

Tarea a entregar. Debes componer un documento que contenga tres partes. En la primera escribe algo básico acerca de los estados de espín. Haz un esfuerzo para que la notación quede clara para alguien que no sepa nada del tema, porque quizá sea el caso del tribunal, y pon algún ejemplo. Hay mucha divulgación de física cuántica en la red e impresa que te animo a que consultes. La segunda parte y más importante, es que, una vez que tengas la notación, expliques qué sentido tiene la precesión en el mundo cuántico y que hagas una comparación con el caso clásico. Explicar de dónde sale (*) te llevaría bastante esfuerzo, por tanto sugiero que lo des por sabido. Termina con alguna reflexión, con la brevedad que decidas, acerca de la invariancia por giros.

Te dejo libertad para la extensión.

Referencias

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

[Zwi13] B. Zwiebach. Quantum physics II. MIT OpenCourseWare. Notas del curso en `https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-05-quantum-physics-ii-fall-2013/`, 2013.