

La importància actual de l'espín de l'electró

Miguel Angel Sanchis Lozano

Departament de Física Teòrica i Institut de Física Corpuscular CSIC-UV

Roger Sanchis Gual

Institute for Robotics and Intelligent Systems, ETH-Zurich (Suïssa)

Introducció històrica

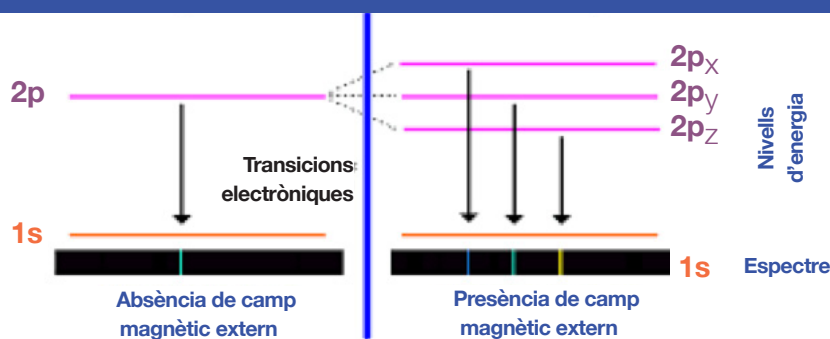
Com ensenya la història de la ciència, una troballa experimental no sempre coincideix amb allò que teòricament s'esperava dins d'un cert paradigma científic, sovint obrint una perspectiva nova d'on emergeix una teoria més general, que no anul·la totalment l'anterior, sinó que l'amplia. Això va ocórrer amb l'experiment de **Stern i Gerlach** (ESG d'ara endavant) el 1922, amb el descobriment *a posteriori* de l'espín de l'electró. De fet, el resultat experimental va ser interpretat incorrectament al principi, com veurem més avall, però, no obstant això, va donar suport a la teoria quàntica primitiva que encara es trobava a les beceroles. El 1900, **Max Planck** (en un "acte de desesperació", segons afirmà ell mateix) havia iniciat una revolució en la física explicant l'espectre d'emissió del cos negre, en postular que l'energia no es podia intercanviar entre els cossos de manera continua, sinó en unitats discretes, els quants. **Niels Bohr**, aplicant aquesta línia als espectres atòmics, va proposar el 1913 un model on només certes òrbites circulars eren permeses d'acord amb unes regles de quantització del moment angular orbital. Poc després, **Arnold Sommerfeld** va ampliar les òrbites possibles passant a ser el·líptiques en general, per tractar d'entendre el desdoblament de nivells energètics en subcapes evidenciat per l'espectroscòpia atòmica d'alta resolució. Cal destacar la important aportació experimental de **Miguel Catalán** per haver estudiat l'espectre del manganés, reconeguda internacionalment. El terme "multiplets" per referir-se a esta estructura de nivells es deu a ell.

Ara bé, l'anomenat a vegades *model de Bohr-Sommerfeld-Catalán*, incloent-hi al savi aragonès, mancava d'una base teòrica sòlida i va caldre esperar una formulació més rigorosa de la Mecànica Quàntica deguda a **Werner Heisenberg** i **Erwin Schrödinger**, entre altres. Llavors, cap als anys 1920, la comunitat científica encara era reticent a acceptar la teoria quàntica amb tants conceptes contraintuïtius, però una prova definitiva de la seua validesa estava en camí. Es tractava del ja citat ESG on es proposava detectar l'anomenada quantització espacial dels orbitals atòmics en interacció amb un camp magnètic estàtic extern, com detallarem en la secció següent.

Però abans d'això, tornem per una estona als espectres atòmics, una peça fonamental per a la constatació de l'existència de nivells energètics discrets, inherent a la teoria quàntica.

L'efecte Zeeman (descobert per **Pieter Zeeman** el 1896) consisteix en el desdoblament de les línies espectrals en més components (i els corresponents nivells energètics) quan els àtoms es situen dins d'un camp magnètic feble. Es distingeix entre l'efecte Zeeman normal i l'anòmal, l'últim observat per **Thomas Preston**, que presentava unes característiques distintes (una multiplicitat diferent) inexplicables segons el model quàntic primitiu. Per aquesta raó, es va anomenar *anòmal*: encara no hi havia cap explicació satisfactòria (a falta de l'espín) per a aquests casos, malgrat que son més freqüents del normal en espectroscòpia.

EFFECTE ZEEMAN



Efecte Zeeman normal: desdoblament de nivells d'energia d'un àtom en presència d'un camp magnètic feble, donant lloc a tres ratlles on abans no n'hi havia més que una.

En efecte, per una banda, la física clàssica podia proporcionar una explicació raonable, tant quantitativa com qualitativa, de l'efecte Zeeman normal invocant la força de Lorentz d'un camp magnètic extern exercida sobre els electrons en òrbites permeses segons el model de Bohr-Sommerfeld. Per contra, era totalment incapaç d'explicar l'efecte Zeeman anòmal, com el desdoblament en multiplets de la sèrie de línies del sodi, en lloc de tres línies com és el cas normal.

A més a més, quan examinem amb alta resolució les línies de l'espectre d'àtoms com l'hidrogen (alcalins), sense cap camp magnètic extern, trobem que són doblets però poc espaiats entre ells, allò que es coneix com a *estructura fina*. És el cas de la línia groga del sodi, que en realitat es resol en dos línies molt pròximes. El seu origen radica en les correccions relativistes del moviment de l'electró al voltant del nucli, incloent la interacció espín-òrbita, essent la constant d'estructura fina $\alpha \approx 1/137$ (introduïda per Sommerfeld), el paràmetre fonamental que regeix l'ordre de magnitud de l'estructura fina dels nivells atòmics ($\approx \alpha^2$).

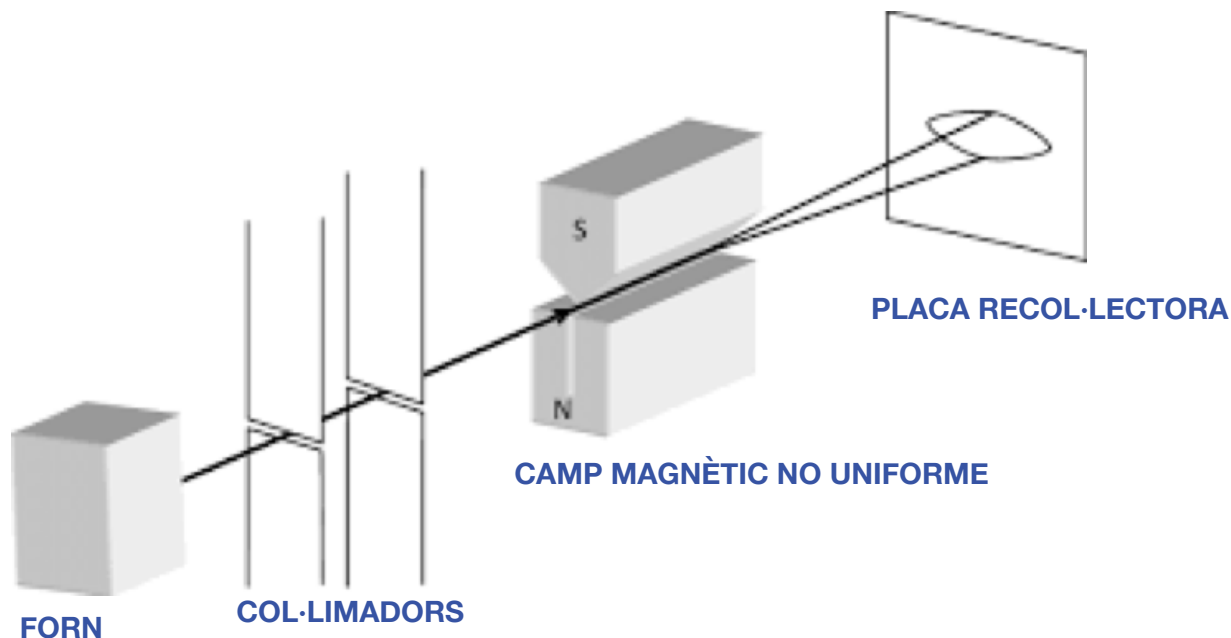
L'efecte Zeeman anòmal havia captivat l'interès d'**Alfred Landé** que estava treballant en un model semi-empíric de l'àtom, a Tübingen, Alemanya. L'any 1925, un jove físic anomenat **Ralph Kronig**, original de la universitat de Colúmbia (EUA) i en viatge d'estudis per Europa, arribà a Tübingen per col·laborar amb Landé, Gerlach i **Pauli**. El dia següent d'arribar va explicar a Pauli la idea d'un electró girant al seu voltant: l'espín (*spin* en anglès significa girar al voltant d'ell mateix) com a solució de l'ESG. Pauli, que ja estava barrejant un possible quart nombre quàntic pels electrons lligats a l'àtom, a banda dels tres ja co-

neguts (principal, orbital i magnètic), va rebutjar no obstant això l'idea de Kronig perquè una visió clàssica d'un electró, girant com si fora una boleta, condueix a dificultats insuperables com, per exemple, superar la velocitat de llum en la seua perifèria.

L'experiment de Stern-Gerlach i el descobriment a posteriori de l'espín

Otto Stern va nàixer el 1888 a la ciutat de Zory dins de l'antic regne de Prússia, mentre que Walther Gerlach, nascut el 1889, era natural de Briebich aleshores també pertanyent a Prússia. Després d'haver recorregut diverses universitats com a investigadors, van coincidir en Frankfurt el 1920. Stern, que havia sigut el primer estudiant d'Albert Einstein a Praga i poc després a Zurich, estudiava els feixos moleculars a l'Institut de Física Teòrica sota la direcció de Max Born. Per la seua banda, Gerlach treballava al veí Institut de Física Experimental mesurant la desviació d'àtoms de bismut per un camp magnètic no homogeni. Una fructífera casualitat.

El 1922, Stern i Gerlach van realitzar en una Alemanya en recessió un experiment històric que va contribuir fonamentalment a acceptar i desenvolupar la teoria quàntica recentment formulada per Bohr i Sommerfeld. La idea era enviar un feix d'àtoms neutres de plata, ben col·limats, a través d'un camp magnètic no uniforme, perpendicular a la direcció de moviment del feix. Cada àtom es comportaria com un imant xicotet sota l'acció del camp magnètic del dispositiu, ja que hom pensava que l'últim electró desparellat de l'àtom de plata tenia un nombre quàntic azimutal igual a 1, és a dir, un moment angular orbital i llavors un moment dipolar magnètic diferent de zero.



Esquema de l'experiment de Stern i Gerlach, el 1922. Un feix ben col·limat d'àtoms de plata neutres escalfats en un forn travessa una regió amb un camp magnètic no homogeni i un altre d'uniforme, i que es desvia en dos trajectòries que originen, sobre una placa recol·lectora, dos taques simètriques amb un espai buit en mig. La física clàssica, en canvi, predeia una taca continua. L'explicació final de la quantització espacial observada suposà el descobriment experimental directe de l'espín de l'últim electró (desparellat) de la plata, i les seues dos possibles orientacions respecte al camp magnètic aplicat. Aquest experiment ha estat repetit amb diferents elements químics, com ara l'hidrogen o el sodi, amb el mateix resultat.

La física clàssica predeia que, segons l'orientació (a l'atzar) del moment dipolar magnètic de l'àtom de plata, la força actuant sobre els diferents àtoms seria distinta, desviant la trajectòria en diferent grau. Doncs, s'esperava una taca continua d'àtoms de plata a la placa recollidora situada a l'eixida de l'imant.

En canvi, d'acord amb la teoria quàntica, cada àtom hauria d'orientar-se cap amunt o cap avall (respecte al camp magnètic extern) amb una probabilitat del 50% cadascuna, sense possibilitats intermèdies, un fenomen típicament quàntic! Aleshores, la meitat dels àtoms de plata estarien sotmesos a una força en direcció contrària a l'altra meitat, en desplaçar-se per la regió de l'imant, de manera que la taca final estaria formada només pel contorn de la clàssicament predita taca continua. Quan Born mateix dubtà de la viabilitat d'aquest tipus d'experiments, Gerlach va contestar: "cap experiment és tan simple que no merezca la pena d'intentar-ho".

Després de resoldre nombrosos problemes tècnics, Stern i Gerlach van trobar, com esperaven, que els àtoms desviats es concentraven a la pel·lícula de detecció en dos úniques taques allargades, en lloc d'omplir totalment la zona entre elles. En un principi, Stern i Gerlach suposaren que aquesta quantització espacial era deguda al moment magnètic orbital no nul de l'àtom de plata, com hem dit més amunt.

Però la història no acaba aquí. El 1927, un dels estudiants de Stern, **Ronald Fraser**, revisant els càlculs del moment magnètic orbital de l'àtom de plata va trobar que era... zero! En un llenguatge actual podem dir que la plata té 47 electrons: 46 omplint els primers orbitals, mentre que l'últim es troba a l'orbital esfèric 5s. Això significava que el feix de plata no hauria d'haver-se dividit en dos i, aleshores, el fonament teòric del resultat de l'ESG era incorrecte.

Hi ha una relació general, ja provenint de la física clàssica, entre el moment magnètic μ i el moment angular L d'una partícula. En el cas de l'electró:

$$\vec{\mu}_L = -g \frac{e\hbar}{2m} \vec{L}$$

on \hbar és la constant de Planck reduïda ($\hbar/2\pi$), m i e són la massa i la càrrega de l'electró, respectivament. El moment angular orbital L està expressat en unitats de \hbar .

L'anomenat factor g_L de Landé representa la raó giromagnètica entre el moment dipolar magnètic (expressat en unitats del magnetó de Bohr $\mu_B = e\hbar/2m$) i el moment angular corresponent. Notem que g_L val 1 en el cas orbital coincidint amb el cas clàssic, però mantenim el símbol per raons de simetria amb l'espín com veurem a continuació. Observem que si el moment angular orbital L és nul, el moment dipolar magnètic μ associat també ho serà i, per tant, la interpretació de l'ESG inicial era clarament incorrecta.

Ara bé, per aquell temps ja s'havia proposat un nou nombre quàntic que podria explicar l'efecte Zeeman anòmal, assolint una de les proves experimentals més firmes de l'existència de l'espín

i el recolzament de la teoria quàntica en darrera instància.

D'acord amb aquesta hipòtesi, un electró posseeix un moment magnètic com a conseqüència d'un moment angular intrínsec d'espín S , introduït per **George Uhlenbeck** i **Samuel Goudsmit** de manera totalment independent pocs mesos després de la proposta fallida de Kronig a Pauli. Llavors

$$\vec{\mu}_S = -g_s \frac{e\hbar}{2m} \vec{S}$$

on S està també expressat en unitats de \hbar .

Amb el fi de reproduir adequadament els desdoblaments de les ratlles espectrals dels àtoms alcalins (més enllà de l'hidrogen) calia ficar a mà $g_S=2$, és a dir, el doble del factor orbital $g_L=1$. En canvi, el desdoblament en doblets de nivells de l'hidrogen només requeria $g_S=1$, ja que les correccions relativistes de Sommerfeld eren suficients per a reproduir l'espaiat del doblet. Un mal de cap! Aquesta fou una de les raons per les quals Pauli va rebre amb desconfiança la introducció de l'espín de l'electró suggerida per Kronig, i poc després per Uhlenbeck i Goudsmit.

Però el 1925 **Llewellyn Thomas** va aconseguir demostrar que en el cas del hidrogen el g_S efectiu és 1 (en lloc de 2) mentre que en altres àtoms polieletrònics l'espín de l'electró és necessari per a explicar correctament el desdoblament de nivells, i les correccions relativistes no són suficients. Per fi, Pauli va quedar convençut sobre la realitat de l'espín com a propietat quàntica fonamental de l'electró associat a un moment magnètic intrínsec, no provenint d'una interpretació clàssica d'un electró-boleta en rotació.

Doncs, l'espín de l'electró postulat *ad hoc* per explicar l'estructura fina dels espectres atòmics (o interacció espín-òrbita), i el resultat de l'ESG *a posteriori*, esdevingué acceptat per la majoria de la comunitat científica d'aleshores. No obstant això, encara faltava trobar un fonament teòric dins de la mecànica quàntica, perquè era clar que el seu origen estava fora de l'esfera de la física clàssica. Buscant un formalisme adequat, el 1927 Pauli va reescriure l'equació de Schrödinger introduint un nou terme d'interacció entre l'espín de l'electró i un camp magnètic. Malauradament, aquest intent patia *ab initio* d'un abast limitat perquè l'espín s'havia introduït a mà i l'equació era no relativista, restant-li un caràcter fonamental dins de la física.

Va ser el 1928, quan **Paul Dirac** va formular l'equació relativista correcta de l'electró, que descriu adequadament la interacció d'un electró amb un camp electromagnètic. En efecte, l'anomenada equació de Dirac parteix directament de la física relativista d'Einstein, descrivint una partícula puntual (sense extensió) de moment angular intrínsec d'espín $1/2$ (en unitats de \hbar). En el límit no relativista i en interacció amb un camp magnètic, reproduceix de manera natural l'equació de Schrödinger-Pauli, amb el factor $g_S=2$ (tot un èxit gens trivial!) a més a més de l'efecte Thomas de

l'estructura hiperfina. Assenyalem que, numèricament, el moment dipolar magnètic de l'electró està donat pel magnetó de Bohr.

D'altra banda, la introducció de l'espín de l'electró quedava fonamentada sobre principis físics molt fermes, i va ser íntimament lligat a la relativitat einsteiniana. Destaquem igualment que l'espín és un concepte típicament quàntic, no essent possible arribar a un límit clàssic perquè és proporcional a \hbar . Llavors, l'electró no és una “boleta” que gira al seu voltant, i l'espín és una propietat intrínseca de les partícules com són la carrega elèctrica o la massa.

A més a més, la mateixa equació de Dirac implica l'existència de l'anomenada “mar de Dirac”: un nombre infinit de solucions d'energia negativa (no observables), origen del concepte de antipartícula en aquell moment. En altres paraules, Dirac va mostrar que el problema relativista i quàntic d'una única partícula perd sentit, suggerint fortament la necessitat de una teoria quàntica de camps. Però això es una altra història a desenvolupar en un altre article.

No obstant això, l'elegant simplicitat de l'equació de Dirac, i el seu poder de predicció (com l'existència de la antimatèria, en particular dels positrons), va donar l'espenta definitiva per a l'acceptació de l'espín dins de la comunitat científica. Vertaderament, a banda d'explicar correctament els espectres atòmics, l'espín juga un paper fonamental en moltes de les propietats físicoquímiques de la matèria, a diversos nivells o escales. Per exemple, duplica el nombre d'electrons al poblar els estats quàntics dels àtoms polieletrònics, respectant el principi d'exclusió de Pauli. Sense l'espín com a nombre quàntic, la taula dels elements químics seria molt diferent de la que coneixem. I el món que coneixem també.

Assenyalem finalment que l'espín no es exclou de les partícules elementals (puntuals) com els electrons, sinó que partícules compostes, com protons i neutrons, gaudixen d'eixa propietat quàntica. També el nucli atòmic pot tindre un espín resultant de la superposició dels espins dels nucleons atòmics. De fet, la interacció entre l'espín nuclear i l'escorça electrònica de l'àtom dona lloc a l'estructura hiperfina dels espectres atòmics que no tractarem ací.

Cercant Nova Física amb l'espín

L'equació de Dirac prediu directament, sense més “additius” teòrics, el valor $g_e=2$ que com hem dit es correspon prou bé amb el valor necessari per explicar l'estructura fina i l'ESG. En realitat aquest valor s'aplica no sols a l'electró sinó a qualsevol partícula d'espín $\frac{1}{2}$, anomenades genèricament *fermions* (en honor a **Enrico Fermi**). Per exemple, el muó, una altra partícula elemental de la família de l'electró però cent vegades més massiva i inestable, també és un fermió. Els muons es produeixen en les interaccions dels raigs còsmics a l'alta atmosfera, o en acceleradors de partícules. Per distingir el factor d'espín g_S de l'electró i del muó, a partir d'ara escrivirem g_e i g_μ , respectivament. En primera aproximació es verifica que

$$g_e = g_\mu = 2$$

No obstant això, les partícules fins i tot elementals poden (i ho fan) interaccionar amb elles mateixes i el buit (quàntic) al seu voltant, canviant les seues característiques pròpies com ara l'espín.

La desviació respecte al valor 2 d'una partícula pura de Dirac, com l'electró, s'escriu introduint el factor a_e tal que:

$$g_e = 2(1 + a_e)$$

La primera correcció al valor esperat de g_e per a l'electró vas ser calculada la primera vegada per **Julian Schwinger** obtenint

$$a_e = (g_e - 2)/2 = \alpha/2\pi$$

Però aquesta correcció només és en primera aproximació. Moltes més correccions addicionals s'han aplicat al càlcul teòric assolint una extrema precisió i un excel·lent acord amb la determinació experimental: 0,21 parts per milió! Un dels millors resultats de tota la física i un èxit rotund de la teoria quàntica aplicada a l'electromagnetisme (electrodinàmica quàntica).

Amb eixe extraordinari acord, ara analitzarem el moment magnètic del muó mitjançant el corresponent factor:

$$a_\mu = (g_\mu - 2)/2$$

que podria obrir una porta a l'anomenada Nova Física. El muó ofereix una millor oportunitat que l'electró degut a la seua major massa, suposant que els nous efectes son proporcionals a les masses.

Recentment s'ha mesurat al laboratori Fermilab (EUA) l'anomalia per al cas del muó, $a_\mu = 0,00116592059(22)$, on entre parèntesi s'indica l'error. D'altra banda, el resultat teòric obtingut en càlculs molt detallats és: $a_\mu = 0,00116591810(43)$, la qual cosa representa una discrepància lleugerament superior a cinc desviacions típiques. Representa aquesta troballa una evidència de Nova Física? És possible, però encara el càlcul teòric es troba sota intensa discussió en torn a la contribució del buit a l'espín del muó.

Aplicacions tecnològiques de l'espín

Com la història, un descobriment, esperat o no, de ciència “pura” sovint dona lloc a aplicacions pràctiques insospitades en el moment de la troballa. El cas de l'espín és paradigmàtic i la llista d'aplicacions hereves de l'ESG i de l'espectroscòpia atòmica seria llarguíssima de descriure en un article com aquest. Només ressaltarem algunes branques de la ciència i la tecnologia on l'espín juga un paper fonamental, sense un caràcter exhaustiu.

Magnetisme molecular i de materials

A partir de l'ESG hem comprovat com l'àtom neutre de plata és comporta com un xicotet imant. Això és un exemple particular del comportament magnètic de la matèria (paramagne-

Una troballa experimental no sempre coincideix amb allò que teòricament s'esperava dins d'un cert paradigma científic, sovint obrint una perspectiva nova d'on emergeix una teoria més general, que no anul·la totalment l'anterior, sinó que l'amplia.

tisme), on un electró desacoblat proporciona un moment dipolar magnètic permanent a nivell atòmic o molecular. Com a conseqüència, un material paramagnètic és atret feblement pels camps magnètics. Ara bé, la majoria de la matèria és diamagnètica, la qual cosa ocorre quan no hi ha moment magnètic net causat pel espín dels electrons. Aleshores, quan s'apropa un camp magnètic a una substància diamagnètica, aquesta és repel·lida degut a la llei de Lenz aplicada a les òrbites atòmiques, com si foren xicotetes espirals.

Anant a una escala superior, les propietats magnètiques de les molècules depenen de la disposició i orientació dels moments dipolars magnètics dels àtoms constituents (actuant com menuts imants) determinats en gran mesura pels espins dels electrons, com ja hem comentat. És interessant anomenar aquí els anomenats nano- o micro-robots (amb grandàries del nano al micròmetre) que en un futur proper es podran guiar magnèticament dins del cos humà amb finalitat biomèdica, tant en la diagnòsi com en el tractament de malalties.

A escales encara superiors, com és el cas dels materials ferromagnètics (ferro, níquel, cobalt...), els moments magnètics atòmics determinats per l'espín s'alini dins d'una xarxa cristal·lina en la mateixa direcció, constituint regions de grandària macroscòpica, anomenades dominis. Així es poden formar els imants permanents. Pel contrari, en el cas de l'antiferromagnetisme, els moments magnètics dels àtoms o molècules s'orienten en direccions oposades, de manera que s'anul·len mútuament. Si l'anul·lació no és completa, els materials s'anomenen ferrimagnètics, com és el cas de la magnetita (òxid de ferro), coneguda des de l'antiguitat i que va donar el nom al fenomen (de la regió Magnèsia, a Grècia).

El camp de la ciència de la matèria condensada és d'interès tant en recerca fonamental com en aplicacions pràctiques: nous materials i dispositius electrònics i magnètics. Per exemple, l'espíntrònica bàsicament consisteix en utilitzar les propietats de l'espín (i la seua polarització)

en corrents, per construir dispositius com discos d'emmagatzematge massiu d'informació. A més a més, el futur dels ordinadors quàntics radica en l'ús de qubits basats en l'espín de l'electró i les seues característiques típicament quàntiques, tal com l'enllaçament.

En el següent apartat desenvolupem una altra important i coneguda aplicació de l'espín per al diagnòstic mèdic.

Ressonància Magnètica Nuclear

La Ressonància Magnètica Nuclear (RMN) és una aplicació mèdica derivada directament del moment magnètic del nucli atòmic, i la seua interacció amb un camp magnètic extern. Aquest mètode de diagnòstic proporciona una imatge detallada de les toves del cos humà, especialment gràcies als protons (hidrogen) que constitueixen la molècula d'aigua, un component majoritari dels teixits orgànics. Recordem que el protó posseïx un espín $\frac{1}{2}$ (com l'electró) amb un moment magnètic propi.

El funcionament de la RMN està essencialment basat en l'aplicació d'un camp magnètic uniform intens als teixits a estudiar, que orientarà els protons (de l'hidrogen) segons la seua direcció. Aleshores, podem distingir dos estats possibles definits per la projecció de l'espín al llarg del camp magnètic (com el cas de l'ESG), amb una diferència d'energia entre ells ben definida (com l'efecte Zeeman).

Si ara s'aplica un pols de radiofreqüència amb la freqüència coincidint amb aquesta diferència d'energia, es produirà un màxim d'absorció (ressonància!) pels protons, passant del nivell energètic més baix al superior, que es pot detectar electrònicament. Allò permet, mitjançant un tractament de dades utilitzant un ordinador i un software sofisticat, reconstruir per "illesques" una imatge 3D molt detallada de la regió del cos estudiada.

Assenyalem que recentment hom ha llevat el terme "nuclear" de la RMN en els informes mèdics habituals, deixant tot curt Ressonància Magnètica (RM). Possiblement el motiu és evitar una connotació negativa en la prova de cara als pacients. En realitat, la RMN no representa cap perill per a la salut perquè no hi ha cap radiació ionitzant.

Resum

L'espín, descobert per una combinació de factors casuals i serendipitat, ha jugat un paper fonamental en la física moderna en l'acceptació i posterior desenvolupament de la mecànica quàntica al llarg del segle XX. Amb seguretat, sense l'ESG dels anys 20, l'espín s'haguera descobert d'una manera o una altra, però la història de com s'aconseguí posar-ho en evidència és una mostra de com avança la ciència, no sempre en línia recta, amb errors i rectificacions sobre la marxa, i contribucions acumulatives de molts científics.

Essent un efecte quàntic i relativista alhora, les seues implicacions cobreixen moltíssims camps teòrics i tecnològics, com hem assenyalat.