Construção da Matriz do Operador de Spin e da Matriz da Função de Spin

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 14 de janeiro de 2020

Conteúdo

1 Introdução

Um dos principais conceitos da teoria quântica do momento angular é o conceito de spin. O operador de spin **S** faz parte da descrição e caracterização do momento angular de vários sistemas: É adicionado ao operador de momento angular orbital **L**, para compor o operador de momento angular total **J**:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \tag{1}$$

Em componentes cartesianas,

$$\mathbf{J} = (L_x + S_x)\,\hat{e}_x + (L_y + S_y)\,\hat{e}_y + (L_z + S_z)\,\hat{e}_z. \tag{2}$$

O operador de momento angular orbital pode ser representado por meio de uma função diferencial. Por exemplo, as componentes cartezianas de $\mathbf{L}$ podem ser expressas em termos dos ângulos polares (θ, ϕ):

$$\begin{aligned}
L_x &= i\left(\mathrm{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
L_y &= i\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\theta\,\mathrm{sen}\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
L_z &= -i\frac{\partial}{\partial\phi}.
\end{aligned}$$

Ademais, as funções de momento angular orbital, os chamados harmônicos esféricos $Y_{l,m}(\theta, \phi)$, também são funções dos ângulos polares.

Mas, e a função de spin? Que linguagem matemática é utilizada para representá-la? Bem, ela *não* é representada por uma função escalar: Uma função que retorna um escalar em cada local do espaço. A função de spin *é representada por uma matriz*.

Igualmente, o operador de spin também é representado por uma matriz — não é representado por uma função diferencial.

Este artigo tem como objetivo apresentar as matrizes do operador e da função de spin e mostrar que o aspecto dessas matrizes depende da base utilizada para construí-las. Para fazer a comparação, serão utilizadas as bases cartesiana e esférica.

2 A notação adotada

O texto segue a gráfica do livro (D. A. Varshalovich, 1988).

$$
\begin{aligned}
(S_x, S_y, S_z) &\longleftarrow \text{componentes cartesianas do operador de spin,}\\
(S_{+1}, S_0, S_{-1}) &\longleftarrow \text{componentes esféricas do operador de spin.}\\
\chi &\longleftarrow \text{função de spin geral,}\\
\chi_{Sm} &\longleftarrow \text{função de spin esférica,}\\
\chi_{Sm}(\sigma) &\longleftarrow \text{elemento de matriz da função de spin esférica,}\\
S &\longleftarrow \text{o valor do spin,}\\
m &\longleftarrow \text{o valor da projeção do spin,}\\
\sigma &\longleftarrow \text{a variável de spin,}\\
\chi_i &\longleftarrow \text{função de spin cartesiana,}\\
\chi_i(\sigma) &\longleftarrow \text{elemento de matriz da função de spin cartesiana.}
\end{aligned}
\tag{3}
$$

3 A representação de base esférica

A função de spin esférica é autofunção do operador de spin (ao quadrado) e também da componente z desse mesmo operador:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{S}^2\chi_{Sm} = S(S+1)\chi_{Sm},\\
&S_z\chi_{Sm} = m\chi_{Sm}.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

O conjunto $\{\chi_{Sm}; m = S, S-1, \ldots, -S+1, -S; \text{total} = 2S+1\}$ forma uma base ortonormal, intitulada, base de funções de spin esféricas, ou simplismente, *base esférica*:

$$
\chi^\dagger_{Sm}\chi_{Sm'} = \delta_{mm'}. \tag{5}
$$

Nota: A matriz $\chi^\dagger_{Sm}$ é a conjugada Hermitiana da χ_{Sm}, quer dizer, $\chi^\dagger_{Sm} = \widetilde{\chi^*_{Sm}}$.

Uma função de spin geral pode ser expandida em quantidades de funções de spin esféricas:

$$
\chi = \sum_{m=-S}^{S} a^m\chi_{Sm}, \tag{6}
$$

com as amplitudes de probabilidade satisfazendo a condição de normalização:

$$\sum_{m=-S}^{S} |a^m|^2 = 1. \tag{7}$$

A matriz da função de spin esférica possui os elementos:

$$\chi_{Sm}(\sigma) = \delta_{m\sigma}, \tag{8}$$

com a variável de spin assumindo os valores:

$$\sigma = S, S-1, \ldots, -S+1, -S. \tag{9}$$

Exemplo: A matrix da função χ_{SS} $(m = S)$ possui os elementos (faz-se a varredura de σ):

$$\chi_{SS} = \begin{bmatrix} \chi_{SS}(S) = \delta_{S,S} \\ \chi_{SS}(S-1) = \delta_{S,S-1} \\ \vdots \\ \chi_{SS}(-S+1) = \delta_{S,-S+1} \\ \chi_{SS}(-S) = \delta_{S,-S} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

E a matrix da função χ_{S-S} $(m = -S)$, os elementos:

$$\chi_{S-S} = \begin{bmatrix} \chi_{S-S}(S) = \delta_{-S,S} \\ \chi_{S-S}(S-1) = \delta_{-S,S-1} \\ \vdots \\ \chi_{S-S}(-S+1) = \delta_{-S,-S+1} \\ \chi_{S-S}(-S) = \delta_{-S,-S} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

Inspecionando (10) e (11), percebe-se que as funções de spin esféricas na sua própria representação, neste caso, na representação de base esférica, são simples.

Fim do exemplo.

O elemento de matrix de um operador de spin é determinado pelo operador de spin entre funções de spin de certa base. Utilizando a base esférica, os únicos elementos não-nulos da tríade (S_x, S_y, S_z) são:

$$
\begin{aligned}
\chi^\dagger_{Sm\pm1} S_x \chi_{Sm} &= \frac{1}{2}\sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)}, \\
\chi^\dagger_{Sm\pm1} S_y \chi_{Sm} &= \mp\frac{i}{2}\sqrt{(S \mp 1)(S \pm m + 1)}, \\
\chi^\dagger_{Sm} S_z \chi_{Sm} &= m.
\end{aligned} \tag{12}
$$

E os únicos elementos não-nulos da tríade (S_{+1}, S_0, S_{-1}) são:

$$
\begin{aligned}
\chi^\dagger_{Sm+1} S_{+1} \chi_{Sm} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(S - m)(S + m + 1)}, \\
\chi^\dagger_{Sm-1} S_{-1} \chi_{Sm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(S + m)(S - m + 1)}, \\
\chi^\dagger_{Sm} S_0 \chi_{Sm} &= m.
\end{aligned} \tag{13}
$$

Dito de outro modo, na representação de base esférica, as componentes do operador de spin tem elementos de matriz não-nulos determinados por (12) e (13).

4 O caso do spin-1/2

Nesta seção, vamos substituir $S = 1/2$ nas equações da [seção 3].

As equações de autofunções e autovalores do operador de spin são:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S}^2 \chi_{\frac{1}{2}m} &= \frac{3}{4}\chi_{\frac{1}{2}m}, \\
S_z \chi_{\frac{1}{2}m} &= m\chi_{\frac{1}{2}m}.
\end{aligned} \tag{14}
$$

O conjunto $\{\chi_{\frac{1}{2}m}; m = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \text{total} = 2\}$ forma uma base ortonormal:

$$
\chi^\dagger_{\frac{1}{2}m}\chi_{\frac{1}{2}m'} = \delta_{mm'}. \tag{15}
$$

Uma função de spin geral pode ser expandida na base esférica $\{\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\}$:

$$\chi = a^{-\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + a^{\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}. \tag{16}$$

Na representação de base esférica, as matrizes das funções de spin esféricas são simples:

$$\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{17}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Na representação de base esférica, as matrizes das componentes cartesianas do operador de spin são:

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{19}$$

$$S_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \tag{20}$$

$$S_z = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{21}$$

e as matrizes das componentes esféricas do mesmo operador são:

$$S_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{22}$$

$$S_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{23}$$

$$S_0 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{24}$$

sendo os elementos de matrizes não-nulos determinados pelas equações (12) e (13).

5 O caso do spin-1

Nesta seção, vamos substituir $S = 1$ nas equações da [seção 3].

As equações de autofunções e autovalores do operador de spin são:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 \chi_{1m} &= 2\chi_{1m}, \\ S_z \chi_{1m} &= m\chi_{1m}. \end{aligned} \tag{25}$$

O conjunto $\{\chi_{1m}; m = 1, 0, -1; \text{total} = 3\}$ forma uma base ortonormal:

$$\chi_{1m}^{\dagger} \chi_{1m'} = \delta_{mm'}. \tag{26}$$

Uma função de spin geral pode ser expandida na base esférica $\{\chi_{11}, \chi_{10}, \chi_{1-1}\}$:

$$\chi = a^{-1}\chi_{1-1} + a^0\chi_{10} + a^1\chi_{11}. \tag{27}$$

Na representação de base esférica, as matrizes das funções de spin esféricas são simples:

$$\chi_{11} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{28}$$

$$\chi_{10} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{29}$$

$$\chi_{1-1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{30}$$

Na representação de base esférica, as matrizes das componentes cartesianas do operador de spin são:

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{31}$$

$$S_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{32}$$

$$S_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{33}$$

e as matrizes das componentes esféricas do mesmo operador são:

$$S_{+1} = - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{34}$$

$$S_{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{35}$$

$$S_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{36}$$

sendo os elementos de matrizes não-nulos determinados pelas equações (12) e (13).

Novos "objetos": As funções de spin cartesianas são as funções χ_i $(i = x, y, z)$. Elas podem ser escritas em termos das funções de spin esféricas:

$$\begin{aligned} \chi_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1-1} - \chi_{11}\right), \\ \chi_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1-1} + \chi_{11}\right), \\ \chi_z &= \chi_{10}. \end{aligned} \tag{37}$$

Substituindo (28), (29) e (30) nas relações (37), determina-se as matrizes das funções de spin cartesianas na representação de base esférica:

$$\chi_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{38}$$

$$\chi_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{39}$$

$$\chi_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{40}$$

Vamos falar mais sobre as funções de spin cartesianas na próxima subseção.

5.1 A representação de base cartesiana

O caso do spin-1 continua, mas agora, na representação de *base cartesiana*.

Nota: Spin-meio não aceita representação de base cartesiana – ver o exemplo da [seção 4].

O conjunto de funções de spin cartesianas $\{\chi_i; i = x, y, z; \text{total} = 3\}$ forma uma base ortonormal, intitulada, base de funções de spin cartesianas, ou simplismente, *base cartesiana*:

$$\chi_i^\dagger \chi_k = \delta_{ik}. \tag{41}$$

A matriz da função de spin cartesiana possui os elementos:

$$\chi_i(\sigma) = \delta_{i\sigma}, \tag{42}$$

sendo que agora a variável de spin assumi os valores:

$$\sigma = x, y, z. \tag{43}$$

Portanto, na representação de base cartesiana, as matrizes das funções de spin cartesians são simples:

$$\chi_x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{44}$$

$$\chi_y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{45}$$

$$\chi_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{46}$$

As funções de spin esféricas podem ser escritas em termos das funções de spin cartesianas:

$$\begin{aligned} \chi_{11} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_x + i\chi_y \right), \\ \chi_{1-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_x - i\chi_y \right), \\ \chi_{10} &= \chi_z. \end{aligned} \tag{47}$$

Substituindo (44), (45) e (46) nas relações (47), determina-se as matrizes das funções de spin esféricas na representação de base cartesiana:

$$\chi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{48}$$

$$\chi_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{49}$$

$$\chi_{10} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{50}$$

Comparação: A base esférica na sua própria representação é simples, compare $\{(28), (29)\ , (30)\}$ com $\{(48), (49)\ , (50)\}$.

Utilizando a base cartesiana para determinar elementos de matriz, os elementos das matrizes das componentes cartesianas do operador de spin são:

$$\chi_k^\dagger S_i \chi_l \equiv (S_i)_{kl} = -i\,\epsilon_{ikl} \qquad (i, k, l = x, y, z), \tag{51}$$

onde ϵ_{ikl} é o tensor de Levi-Civita.

Isso quer dizer que os únicos elementos não-nulos são:

$$\begin{aligned} (S_x)_{yz} &= -i, \qquad & (S_x)_{zy} &= i, \\ (S_z)_{xy} &= -i, \qquad & (S_z)_{yx} &= i, \\ (S_y)_{zx} &= -i, \qquad & (S_y)_{xz} &= i. \end{aligned} \tag{52}$$

Então, na representação de base cartesiana, as matrizes das componentes cartesianas do operador de spin são:

$$S_x = \begin{bmatrix} (S_x)_{xx} & (S_x)_{xy} & (S_x)_{xz} \\ (S_x)_{yx} & (S_x)_{yy} & (S_x)_{yz} \\ (S_x)_{zx} & (S_x)_{zy} & (S_x)_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \tag{53}$$

$$S_y = \begin{bmatrix} (S_y)_{xx} & (S_y)_{xy} & (S_y)_{xz}\,, \\ (S_y)_{xx} & (S_y)_{xy} & (S_y)_{xz}\,, \\ (S_y)_{yx} & (S_y)_{yy} & (S_y)_{yz} \\ (S_y)_{zx} & (S_y)_{zy} & (S_y)_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{54}$$

$$S_z = \begin{bmatrix} (S_z)_{xx} & (S_z)_{xy} & (S_z)_{xz} \\ (S_z)_{yx} & (S_z)_{yy} & (S_z)_{yz} \\ (S_z)_{zx} & (S_z)_{zy} & (S_z)_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{55}$$

As componentes esféricas do operador de spin podem ser escritas em termos das componentes cartesianas desse mesmo operador:

$$\begin{aligned} S_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_x + iS_y\right), \\ S_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_x - iS_y\right), \\ S_0 &= S_z. \end{aligned} \tag{56}$$

Substituindo (53), (54) e (55) nas relações (56), determina-se as matrizes das componentes esféricas do operador de spin na representação de base cartesiana:

$$S_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 0 \end{bmatrix}, \tag{57}$$

$$S_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ -1 & i & 0 \end{bmatrix}, \tag{58}$$

$$S_0 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{59}$$

6 Conclusão

A comparação das matrizes de um “objeto” de spin, construídas na representação de base esférica, com as matrizes desse mesmo “objeto”, mas agora construídas na representação de base cartesiana, mostra que o aspecto dessas matrizes depende da base utilizada para construí-las. Para ilustrar, compare as componentes esféricas do operador de spin: {(34), (35) , (36)} com {(57), (58) , (59)}.

Referências

D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. K. (1988). *Quantum Theory of Angular Momentum*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. , ISBN 9971-50-107-4, 1st edition.