Propiedades del espín 1/2. Matrices de Pauli.

Vamos a considerar tres operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, y $\hat{S}_z$ hermíticos de modo que verifiquen las reglas de conmutación de un momento angular, es decir:

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

y así sucesivamente para el resto de los conmutadores. Estas reglas de conmutación se pueden expresar también de la forma:

$$\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = i\hbar\hat{\mathbf{S}}$$

A partir de estos operadores podemos definir un nuevo operador como $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ que conmuta con los tres operadores anteriores. Al igual que para el momento angular ordinario, podemos encontrar una base de vectores comunes al operador $\hat{S}^2$ y a un de los operadores anteriores que puede ser por ejemplo $\hat{S}_z$. Los vectores comunes a los dos operadores los podemos etiquetar de la forma $|s, m_s\rangle$, de modo que:

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle \\ S_z |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle \end{aligned}$$

donde $m_s = -s, \cdots, s$. Se puede demostrar que las relaciones anteriores son una consecuencia directa de la reglas de conmutación de los operadores $\hat{\mathbf{S}}$. Del mismo modo también se puede demostrar que el número s sólo puede tomar valores enteros o semienteros positivos. Vamos a considerar el caso en que $s = \frac{1}{2}$. En este caso el número m_s sólo puede tomar dos valores que son $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Tenemos por tanto sólo dos vectores que son $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ y $\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$. Y las relaciones anteriores se reducen a:

$$\begin{aligned} &\hat{S}^2 \left|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2 \left|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right\rangle \qquad &&\hat{S}^2 \left|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2 \left|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle \\ &\hat{S}_z \left|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar \left|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right\rangle \qquad &&\hat{S}_z \left|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\tfrac{1}{2}\hbar \left|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle \end{aligned}$$

Si vamos a considerar siempre que $s = \frac{1}{2}$ en realidad no hace falta la primera etiqueta en los vectores anteriores. De hecho para distinguir los vectores anteriores sólo hace falta una etiqueta que tome dos valores. Por ejemplo podemos etiquetar los vectores anteriores mediante un signo (el signo de m_s), de modo que $|+\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ y $|-\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$. De forma que los vectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$ verifican las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} &\hat{S}^2 |+\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2 |+\rangle \qquad &&\hat{S}^2 |-\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2 |-\rangle \\ &\hat{S}_z |+\rangle = \tfrac{1}{2} |+\rangle \qquad &&\hat{S}_z |-\rangle = -\tfrac{1}{2}\hbar^2 |-\rangle \end{aligned}$$

o bien simplificando aún más la notación: $\hat{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle$ y $\hat{S}_x |\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar |\pm\rangle$.

En la base formada por los vectores $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ los operadores $\hat{S}^2$ y $\hat{S}_z$ son diagonales y vienen representados por las siguientes matrices:

$$\hat{S}^2 \equiv \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

de hecho el operador $\hat{S}^2$ no sólo es diagonal sino que actúa como si fuera una constante $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$. Vamos a calcular ahora las matrices correspondientes a los operadores $\hat{S}_x$ y $\hat{S}_y$. Al igual que hicimos con el momento angular conviene definir dos nuevos operadores $\hat{S}_+$ y $\hat{S}_-$ de modo que:

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \text{y} \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

Se pueden comprobar fácilmente las siguientes reglas de conmutación:

$$\left[\hat{S}_z, \hat{S}_+\right] = \hbar\hat{S}_+ \quad \text{y} \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_-\right] = -\hbar\hat{S}_-$$

Por otro lado se pueden demostrar también las siguientes igualdades (de forma análoga a como hicimos con el momento angular):

$$\hat{S}_+ \left|s, m_s\right\rangle = \hbar\sqrt{s\left(s+1\right) - m_s\left(m_s+1\right)} \left|s, m_s+1\right\rangle$$

$$\hat{S}_- \left|s, m_s\right\rangle = \hbar\sqrt{s\left(s+1\right) - m_s\left(m_s-1\right)} \left|s, m_s-1\right\rangle$$

de estas relaciones podemos ver cómo actúan los operadores $\hat{S}_\pm$ sobre los vectores $\left|\pm\right\rangle$:

$$\begin{array}{ll} \hat{S}_+ \left|+\right\rangle = 0 & \hat{S}_+ \left|-\right\rangle = \hbar\left|+\right\rangle \\ \hat{S}_- \left|+\right\rangle = \hbar\left|-\right\rangle & \hat{S}_+ \left|-\right\rangle = 0 \end{array}$$

Por tanto los operadores $\hat{S}_\pm$ están representados en la base $\{\left|+\right\rangle, \left|-\right\rangle\}$ por las siguientes matrices:

$$\hat{S}_+ \equiv \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \hat{S}_- \equiv \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Por último, a partir de $\hat{S}_+$ y $\hat{S}_-$ podemos obtener los operadores $\hat{S}_x$ y $\hat{S}_y$ como:

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right) \quad \text{y} \quad \hat{S}_y = \frac{i}{2}\left(\hat{S}_- - \hat{S}_+\right)$$

de modo que los operadores $\hat{S}_x$ y $\hat{S}_y$ están representados mediante las siguientes matrices:

$$\hat{S}_x \equiv \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \hat{S}_y \equiv \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Los operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ y $\hat{S}_z$ se pueden expresar utilizando las matrices de Pauli, que son:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

de modo que $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ y $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$. Se puede comprobar que las matrices de Pauli tienen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x &= 0 \\ \left[\sigma_x, \sigma_y\right] &= 2i\sigma_z \\ \sigma_x\sigma_y &= i\sigma_z \end{aligned}$$

y propiedades análogas si realizamos una permutación cíclica de los índices x, y y z. Además:

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \\
\mathrm{Tr}\,(\sigma_x) &= \mathrm{Tr}\,(\sigma_y) = \mathrm{Tr}\,(\sigma_z) = 0 \\
\mathrm{Det}\,(\sigma_x) &= \mathrm{Det}\,(\sigma_y) = \mathrm{Det}\,(\sigma_z) = -1
\end{aligned}$$

Finalmente vamos a resolver el problema de autovalores de los operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ y $\hat{S}_z$. Está claro que los autovalores de los tres operadores son los número $\pm\frac{\hbar}{2}$, de modo que sólo tenemos que calcular los autovectores. El operador $\hat{S}_z$ es diagonal, de modo que sus autovectores son $|\pm\rangle$ de autovalor $\pm\frac{\hbar}{2}$ (salvo un factor global de fase). Vamos a ver cuales con los autovectores de $\hat{S}_x$:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

De modo que los autovectores son $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle \pm |-\rangle\right)$ de autovalor $\pm\frac{\hbar}{2}$. Por último los autovectores de $\hat{S}_y$ satisfacen la siguiente ecuación:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Por tanto los autovectores de $\hat{S}_y$ son $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle \pm i\,|-\rangle\right)$ de autovalor $\pm\frac{\hbar}{2}$.