

PRODUTO VETORIAL NÃO LINEAR PARA DESCREVER ROTAÇÕES NA FÍSICA QUÂNTICA

Sylvestre Schneider

Departamento de Física. Centro de Ciências Naturais e Exatas.UFSM.
Santa Maria, RS.

RESUMO

Desenvolve-se um método para tratar rotações sucessivas em termos de produtos não lineares de vetores de rotação. Combinações de produtos vetoriais e escalares ordinários dão os mesmos resultados que podem ser mais comumente atingidos pelo uso de quaternions ou matrizes unitárias 2×2 . O método fornece automaticamente a direção do eixo e o valor do ângulo de rotação singular (única), que é equivalente ao produto de duas ou mais rotações sucessivas. Esta informação não é obtida pronta e imediatamente pelo método usual de matrizes de rotação para solucionar o problema de rotações sucessivas. O método aplica-se ao caso de uma rotação ao redor da direção $\{111\}$, rotações π sucessivas ao redor de eixos ortogonais, e o tratamento de rotações contínuas.

Além disso, simplifica o problema do cálculo da simetria cristalina, onde o conhecimento desta é de grande utilidade, para prever autovalores do Hamiltoniano e, conseqüentemente, prever o número de níveis energéticos de sistemas cristalinos, mediante meras considerações de simetria. As rotações sucessivas permitem verificar a (conservação) invariância de simetria do sistema, bem como a invariância do Hamiltoniano do sistema.

SUMMARY

SCHNEIDER, S., 1979. Nonlinear vector product for describing rotations in quantum physics. *Ciência e Natura* (1): 1-9.

A method is developed for treating successive rotations in terms of nonlinear products of rotation vectors. Combinations of ordinary scalar and vector products yield the same results that may be more commonly arrived at by the use of quaternions or 2×2 unitary matrices. The method presented here, automatically provides us the direction of the axis and the value of the rotation angle of the single rotation that is equivalent to the product of two or more successive rotations. This information is not readily obtained from the usual matrix rotation method of solving the successive rotation problem. The method is applied to the case of a rotation about the $\{111\}$ direction,

successive π rotations about orthogonal axes, and the treatment of continuous rotations.

It also useful in Quantum Physics, Lorentz matrix representation and symmetry studies in solid state Physics.

INTRODUÇÃO

Por muitos anos foi conhecido que a rotação única, correspondendo a várias rotações sucessivas, pode ser determinada de várias maneiras tais como (a) o produto de matrizes ortogonais reais 3×3 (grupo $O(3)$), (b) o produto de matrizes unitárias 2×2 (grupo $SU(2)$), e (c) o produto de quaternos. Destes três métodos o mais largamente usado, e o único que é de importância em cursos de física elementares, é o primeiro. Infelizmente (ou desafortunadamente) há algumas aplicações importantes nas quais o método $O(3)$ não é o mais útil; em particular, é o menos útil de todos para responder a pergunta: "Qual é a direção e o ângulo de rotação correspondente à resultante de várias rotações sucessivas?"

Por exemplo, LANDAU & LIFSHITZ (3) descrevem o produto de rotações de um ângulo π ao redor de dois eixos secantes e de um ângulo θ como mostra a Figura 1, e mesmo neste caso simples a descrição deles é bastante complicada.

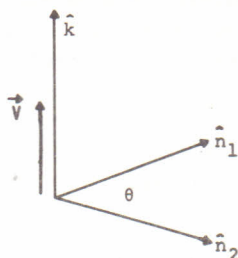


Figura 1. Vetores unitários $\hat{n}_1$ e $\hat{n}_2$ estando no plano xy e direcionados ao longo dos dois eixos que se interseccionam num ângulo θ . O vetor de rotação V corresponde a uma rotação π ao redor da direção $\hat{n}_1$ seguido por uma rotação π ao redor da direção $\hat{n}_2$ é mostrado segundo a direção do eixo Z .

Sentimos que as aproximações $SU(2)$ e quaternos não são apresentadas comumente em cursos introdutórios standard de graduação porque os conceitos matemáticos que estão envolvidos são algo sofisticados. Neste artigo mostramos como produtos vetoriais e escalares ordinários podem ser usados para reproduzir os resultados destes dois

métodos.

A maneira costumeira de tratar rotações arbitrárias no espaço de coordenadas tri-dimensional é de se fazer uso de uma matriz de rotação $3 \times 3, R$.

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Para descrever a rotação única R_3 que é equivalente a duas rotações sucessivas R_1 e R_2 ao redor de eixos arbitrários, efetuamos uma multiplicação de matrizes

$$R_3 = R_1 R_2 \quad (2)$$

As matrizes R_1 e R_2 são escritas para rotações ao redor dos eixos coordenados, e não é fácil dizer a direção do eixo de rotação único equivalente ou o ângulo em relação a este eixo único, a partir da análise da forma de R_3 .

O intento do presente trabalho é de apresentar um método de tratamento de rotações sucessivas em termos de produtos simples não lineares.

Este método fornece, automaticamente, a direção do eixo e o ângulo da rotação única que é gerada por duas ou mais rotações sucessivas ao redor de eixos arbitrários.

O PRODUTO VETORIAL NÃO LINEAR

A rotação no espaço tri-dimensional por um ângulo ϕ em relação a uma direção definida pelo vetor unitário $\hat{n}$, pode ser caracterizado por um vetor de rotação V :

$$V = \hat{n} \sin(\phi/2) \quad (3)$$

Podemos também definir um escalar f ,

$$f = (1 - V^2)^{1/2} \quad (4)$$

$$= \cos(\phi/2), \quad (5)$$

associado com esta rotação. As equações (3) e (4) parecem-se com as componentes de um quaterno.

Uma rotação caracterizada pelo vetor de rotação V_1 seguida por uma rotação caracterizada pelo vetor de rotação V_2 é dada pelo vetor de rotação V_3 .

Mostramos no apêndice que V_3 tem a forma da equação (A.14):

$$V_3 = V_1 \times V_2 + V_1 f_2 + V_2 f_1 \quad (6)$$

Chamaremos este produto não linear ou esta operação produto vetorial não linear o produto quadrático cruzado como o símbolo

$$V_3 = V_2 \boxed{\times} V_1. \quad (7)$$

Mostraremos também no apêndice Eq. (A.12) que F_3 corresponde ao vetor de rotação V_3 é obtido do produto

$$f_3 = f_1 f_2 - V_1 \cdot V_2. \quad (8)$$

Este produto será chamado o "produto quadrático puntual" com o símbolo

$$f_3 = V_2 \boxed{\cdot} V_1 \quad (9)$$

Por isto definimos o produto vetorial de dois vetores como

$$V_2 \boxed{\times} V_1 = V_1 \times V_2 + V_1 f_2 + V_2 f_1 \quad (10)$$

$$V_2 \boxed{\cdot} V_1 = f_1 f_2 - V_1 \cdot V_2 \quad (11)$$

Podemos ver das formas das equações (10) e (11) que a operação produto quadrática cruzada é não comutativa,

$$V_2 \boxed{\times} V_1 \neq V_1 \boxed{\times} V_2 \quad (12)$$

enquanto o produto quadrático puntual é comutativo

$$V_2 \boxed{\cdot} V_1 = V_1 \boxed{\cdot} V_2 \quad (13)$$

Para duas rotações paralelas iguais temos

$$V \boxed{\times} V = 2fV. \quad (14)$$

Para uma rotação e sua recíproca temos V e $-V$, respectivamente:

$$V^{-1} = -V \quad (15)$$

$$V \boxed{\times} (-V) = 0 \quad (16)$$

A não rotação deixa V invariável:

$$V \boxed{\times} 0 = V, \quad V \boxed{\cdot} 0 = f. \quad (17)$$

Como por exemplo da vantagem deste produto, solucionamos o problema apresentado na introdução, nomeadamente, aquele das duas rotações de um ângulo π ao redor de dois eixos que se cortam de um ângulo θ . A primeira rotação ao redor do eixo x , por exemplo, é representada por: $V_1 = \hat{n}_1 = \hat{i}$, $f_1 = 0$. É seguido por uma rotação π em relação a um eixo no plano xy orientada de um ângulo θ relativamente ao eixo x o que é representado por: $V_2 = \hat{n}_2 = \hat{i} \cos \theta + \hat{j} \sin \theta$, $f_2 = 0$.

Estes eixos são mostrados na Figura 2. A rotação composta é dada pela equação (10):

$$V = V_2 \boxed{\times} V_1 = V_1 \times V_2 = k \sin \theta = \bar{k} \sin (2\theta/2).$$

Então a rotação equivalente única é por um ângulo $2\theta = \phi$ ao redor da direção $\bar{k}$. O vetor V é mostrado na Figura 1.

TRES ROTAÇÕES SUCESSIVAS

O resultado da Eq. (10) pode ser estendido facilmente a três ou mais rotações sucessivas. Em particular, é útil ter uma expressão

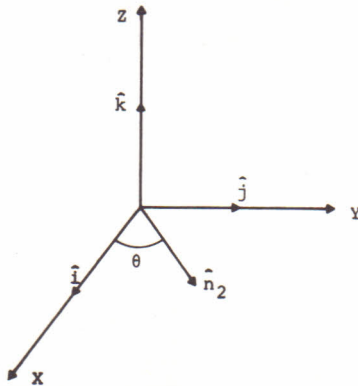


Figura 2. Vetores unitários $\hat{i}$, $\hat{j}$, e $\hat{k}$ ao longo das direções do sistema de 3 eixos cartesianos e o vetor unitário $\hat{n}_2$ estando no plano xy.

para três rotações sucessivas.

$$\begin{aligned} V_3 \begin{bmatrix} X \\ V_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ V_1 \end{bmatrix} &= f_1(V_2 X V_3) + f_2(V_1 X V_3) + \\ &+ f_3(V_1 X V_2) - V_1(V_2 \cdot V_3) + V_2(V_1 \cdot V_3) \\ &- V_3(V_1 \cdot V_2) + f_2 f_3 V_1 + f_1 f_3 V_2 + f_1 f_2 V_3 \quad (18) \end{aligned}$$

Como podemos ver, a Eq.(18) mostra que o produto triplo é associativo.

ROTAÇÃO DE UM VETOR

Tão longe, ou até agora mostramos a resultante de duas rotações sucessivas; agora veremos como rotaremos um vetor. O vetor anotado por $\underline{U}$ tem a magnitude U e a direção $\hat{n}$:

$$\underline{U} = U \hat{n} \quad (19)$$

Efeturemos a rotação do vetor unitário $\hat{n}$ para produzir um novo vetor unitário $\hat{n}'$ orientado numa direção diferente. Desde que a magnitude U não é afetada pela rotação, obtemos:

$$\underline{U} = U \hat{n}'$$

O vetor unitário $\hat{n}$ está na forma de um vetor de rotação, e assim ele pode ser transformado pela Eq.(18) com V_1 igual ao recíproco de V_3 :

$$\hat{n}' = V \begin{bmatrix} X \\ \hat{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ V^{-1} \end{bmatrix} = V \times \hat{n} \begin{bmatrix} X \\ (-V) \end{bmatrix} \quad (20)$$

onde usamos a propriedade que $V^{-1} = -V$ da Eq.(15).

Fazendo uso da Eq.(18), obtemos:

$$\hat{n}' = 2f\hat{n} \times V + 2V(V \cdot \hat{n}) + \hat{n}(1 - aV^2). \quad (21)$$

Como outro exemplo da eficiência deste tipo de produto ve

torial, usaremos a Eq.(21) para resolver o problema discutido por PALAZZOLO(5), de rodar um sistema de coordenadas ao redor do eixo $\{111\}$ pelos ângulos $\phi = 120^\circ$ e $\phi \neq 120^\circ$, como é mostrado na Figura 3.0 vetor de rotação V na direção $\{111\}$ é dado por

$$V = \left[(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) / 3^{1/2} \right] \sin(\phi/2), \quad (22)$$

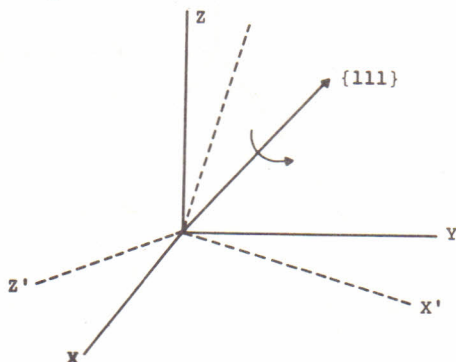


Figura 3: Rotação em relação a direção $\{111\}$ por um ângulo arbitrário. Estão mostrados os eixos x, y, z antes e os eixos x', y', z' depois da rotação.

onde ϕ é o ângulo de rotação ($\phi=120^\circ$ para o exemplo de MARION(4)). Para achar o efeito desta rotação no sistema de coordenadas, precisamos aplicá-lo a cada um dos eixos. Começamos pelo eixo x . O vetor unitário $\hat{n}$ ao longo do eixo x é dado por

$$\hat{n} = \hat{i} \quad (23)$$

Aplicando a Eq.(21), obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{n}' = & (\hat{i}/3)(1+2 \cos \phi) + (\hat{j}/3)(1-\cos \phi - 3^{1/2} \sin \phi) \\ & + (\hat{k}/3)(1-\cos \phi + 3^{1/2} \sin \phi). \end{aligned} \quad (24)$$

Para o caso onde $\phi=120^\circ$ temos

$$\hat{n}' = \hat{k}, \quad (25)$$

e para o caso onde $\phi=119^\circ$

$$\sin(119^\circ) = 0.8746$$

$$\cos(119^\circ) = 0.4848$$

$$\hat{n}' = 0.01013\hat{i} - 0.01002\hat{j} + 0.99988\hat{k} \quad (26)$$

Naturalmente, para os eixos y e z o procedimento é análogo. Com uma complicação sensivelmente maior o problema de rotação não somente ao redor uma direção $\{111\}$ mas ao redor de qualquer direção pode ser resolvido facilmente com a ajuda da equação (21).

ROTAÇÕES CONTÍNUAS

As secções anteriores descreveram rotações sucessivas in

dividuais. Outro caso importante envolve rotações contínuas onde o vetor de rotação é uma função do tempo.

Para ilustrar o caso de rotação contínua consideraremos a evolução temporal de um vetor $V_{(t)}$ que representa a rotação acumulativa a partir de um tempo $t=0$ até um tempo t . Um intervalo de tempo curto, após, o vetor $V_{(t+\Delta t)}$ estará relacionado com $V_{(t)}$ por uma rotação incremental $\dot{V}_{(\Delta t)}$ que roda de um ângulo $\Delta\phi$ no tempo Δt em relação a uma direção instantânea definida pelo vetor unitário $\hat{n}$. Portanto, da Eq.(7) podemos escrever:

$$V_{(t+\Delta t)} = V_{(\Delta t)} \boxed{X} \cdot V_{(t)}. \quad (27)$$

O vetor de rotação $V_{(t)}$ tem o escalar associado $f(t)$.

O vetor de rotação incremental $V_{(\Delta t)}$ é uma função de t e Δt e tem forma

$$V_{(\Delta t)} = \hat{n} \sin(\Delta\phi/2) \approx (\hat{n}\Delta\phi/2) \approx (\hat{n}\omega\Delta t/2) \approx (\omega\Delta/2), \quad (28)$$

onde supomos uma rotação incremental ($\Delta\phi \ll 1$) com a velocidade angular ω durante o tempo Δt , e ω é na direção de $\hat{n}$. O fator $f(\Delta t)$ associado com $V_{(\Delta t)}$ é essencialmente unitário:

$$f(\Delta t) = (1 - V_{(\Delta t)}^2)^{1/2} \approx (1 - \omega^2 \Delta t^2 / 4)^{1/2} \approx 1, \quad (29)$$

pois $\omega\Delta t \ll 1$.

Com o auxílio das Eqs.(28) e (29) podemos usar a Eq. (10) para escrever a Eq.(27) da seguinte maneira.

$$V_{(t+\Delta t)} = (\Delta t/2) \dot{V}_{(t)} \times \omega + V_{(t)} + (f\Delta t/2)\omega. \quad (30)$$

A derivada em relação ao tempo de V é

$$\dot{V} = (V_{(t+\Delta t)} - V_{(t)})/\Delta t,$$

que se torna, usando a Eq. (30),

$$\dot{V} = (1/2)V \times \omega + (f/2)\omega. \quad (31)$$

Podemos formar os produtos $\dot{V} \cdot \dot{V}$ e $\dot{V} \times \dot{V}$,

$$\dot{V} \cdot \dot{V} = (f/2) V \cdot \omega \quad (32)$$

e

$$\begin{aligned} \dot{V} \times \dot{V} &= (1/2)V \cdot \omega - (1/2)V^2 \omega + \\ &+ (f/2)V \times \omega, \end{aligned} \quad (33)$$

e os fatores $V \times \omega$ da Eq.(31) e $V \cdot \omega$ da Eq.(32) podem ser substituídos na Eq.(33) para dar

$$V \times \dot{V} = V(V \cdot \dot{V})/f - (1/2)\omega(V^2 + f^2) + f\dot{V}. \quad (34)$$

Isto pode ser simplificado observando que $V^2 + f^2 = 1$ da equação (4), e $\dot{f} = \frac{d}{dt} (1 - V^2)^{1/2} = -\frac{2}{f} V \cdot \dot{V}$ (35)

para dar, resolvendo para ω na Eq.(34)

$$\omega = 2 \left[\dot{V} \times V + f\dot{V} - (\dot{f}/2)V \right] \quad (36)$$

Então obtivemos uma expressão para a rotação instantânea e para o eixo de rotação instantâneo, em termos da dependência temporal de um vetor de rotação V .

APÊNDICE

A rotação geral de um ângulo ϕ em relação a um eixo arbitrário cuja direção é definida pelo vetor unitário $\hat{n}$, pode ser escrito(5):

$$R = \left[\exp \left((\phi/2) i \hat{n} \cdot \sigma \right) \right], \quad (A.1)$$

onde σ é um operador vetorial cujas componentes são as matrizes de spin PAULI

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (A.2)$$

A exponencial da Eq.(A.1) pode ser expandida numa série de potências, e os termos agrupados dando

$$R = \cos(\phi/2) + i \hat{n} \cdot \sigma \sin(\phi/2), \quad (A.3)$$

onde entendemos que a matriz unitária (2x2) multiplica o termo $\cos(\phi/2)$.

Para tratar duas rotações sucessivas, escrevemos seus operadores de rotação correspondentes R_1 e R_2 na forma da Eq.(A.3).

$$R_1 = \cos(\phi_1/2) + i \hat{n}_1 \cdot \sigma \sin(\phi_1/2) \quad (A.4)$$

e

$$R_2 = \cos(\phi_2/2) + i \hat{n}_2 \cdot \sigma \sin(\phi_2/2).$$

e multiplicamos os dois para dar

$$\begin{aligned} R_3 &= R_2 R_1 = \\ &= \cos(\phi_2/2) \cos(\phi_1/2) + i \hat{n}_1 \cdot \sigma \sin(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) + \\ &+ i \hat{n}_2 \cdot \sigma \sin(\phi_2/2) \cos(\phi_1/2) \\ &- (\hat{n}_1 \cdot \sigma)(\hat{n}_2 \cdot \sigma) \sin(\phi_1/2) \sin(\phi_2/2). \end{aligned} \quad (A.5)$$

Podemos fazer uso da propriedade

$$(a \cdot \sigma)(b \cdot \sigma) = a \cdot b + i(a \times b) \cdot \sigma \quad (A.6)$$

para descrever a Eq.(A.6) na forma

$$\begin{aligned} R_3 &= \left[\cos(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) \right. \\ &\quad \left. - \hat{n}_2 \cdot \hat{n}_1 \sin(\phi_1/2) \sin(\phi_2/2) \right] \\ &\quad + i \hat{n}_1 \cdot \sigma \sin(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) \end{aligned}$$

$$+i\tilde{n}_2 \cdot \sigma \sin(\phi_2/2) \cos(\phi_1/2) \\ - (\tilde{n}_2 \times \tilde{n}_1) \cdot \sigma \sin(\phi_1/2) \sin(\phi_2/2). \quad (A.7)$$

Desde que R_3 é um operador de rotação, isto pode ser es
crita na forma da Eq.(A.3):

$$R_3 = \cos(\phi_3/2) + i\tilde{n}_3 \cdot \sigma \sin(\phi_3/2). \quad (A.8)$$

Comparação feita das Eqs.(A.7) e (A.8) conduz a identi
cação

$$\cos(\phi_3/2) = \cos(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) \\ - \tilde{n}_1 \cdot \tilde{n}_2 \sin(\phi_1/2) \sin(\phi_2/2). \quad (A.9)$$

$$\tilde{n}_3 \sin(\phi_3/2) = \tilde{n}_1 \sin(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) \\ + \tilde{n}_2 \sin(\phi_2/2) \cos(\phi_1/2) \\ + \tilde{n}_1 \times \tilde{n}_2 \sin(\phi_1/2) \sin(\phi_2/2). \quad (A.10)$$

Estas expressões (A.9) e (A.10) foram obtidas anteriorment
te por HALPERN(2) e SCHWINGER(6) usando um método diferente. Se exa
minarmos a Eq.(A.10), vemos que isto pode ser colocado na forma

$$V_3 = V_1 \times V_2 + \cos(\phi_1/2) V_2 \cos(\phi_2/2), \quad (A.11)$$

e a Eq.(A.9) torna-se

$$f_3 = f_1 f_2 - V_1 \cdot V_2 \quad (A.12)$$

$$\text{onde } f_i = \cos(\phi_i/2). \quad (A.13)$$

combinando as Eqs.(A.11) e (A.13), obtemos

$$V_3 = V_1 \times V_2 + V_1 f_2 + V_2 f_1 \quad (A.14)$$

BIBLIOGRAFIA CITADA

1. ARFKEN, G. *Mathematical Methods for Physicists*. New York, Academic, 1970.
2. HALPERN, F. *Special relativity and quantum mechanics*. Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, 1968.
3. LANDAU, L.D. & LIFSHITZ, E.M. *Quantum mechanics*. Reading, MA, Addison-Wesley, 1958.
4. MARION, J.B. *Classical dynamics of particles and systems*. New York, Academic, 1970.
5. PALAZZOLO, A. American Journal of Physics, New York, V.44, M. 63, 1976.
6. SCHWINGER, J. *Quantum kinematics and dynamics*. New York, Benjamin, 1970.

Recebido em julho, 1979; aceito em setembro, 1979.

