AULA 8

Mecânica Quântica I

AULA 8

Simetrias e Leis de Conservação

Uma simetria é uma equivalência entre situações físicas distintas. Simetrias são induzidas por transformações físicas que geram propriedades invariantes.

A evolução de um sistema físico, como vimos, pode ser entendida na descrição de

- Schrödinger: vetores de estado evoluem, observáveis não
- Heisenberg: observáveis evoluem, vetores de estado não.

De maneira similar todas as transformações quânticas podem ser classificadas em

- transformações dos vetores de estado (transformações ativas)

$$|\psi\rangle \xrightarrow{T} |\psi'\rangle$$

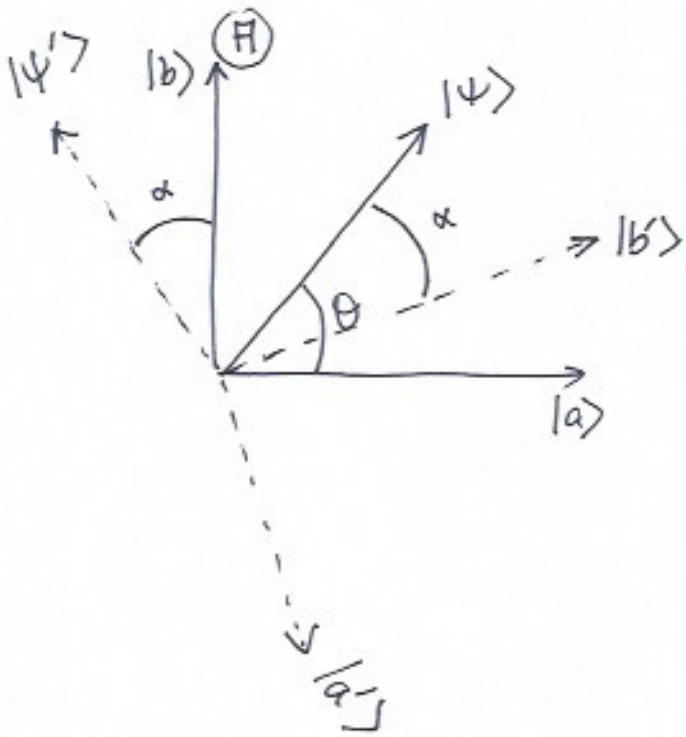
considerando $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ a partir do mesmo referencial F

- transformações dos observáveis (transformações passivas)

podem ser entendidas como uma mudança de eixo de coordenadas, corresponde a uma visão do estado original em um novo referencial F'.

Vamos adotar aqui a descrição ativa, mas antes disso deixe-nos esclarecer a diferença:

Ex:



$|\psi\rangle = \cos\theta\,|a\rangle + \operatorname{sen}\theta\,|b\rangle$

$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ em (H)

Vemos que $|\psi\rangle$ na nova base $\{|a'\rangle, |b'\rangle\} \equiv |\psi'\rangle$ na base antiga $\{|a\rangle, |b\rangle\}$

Sejam F e F' dois referenciais inerciais relacionados por uma ou mais das seguintes transformações:

- translação no espaço ou no tempo
- rotação no espaço
- boost
- reflexão espacial $\vec{r} \to -\vec{r}$
- reversão temporal $t \to -t$

Considere um sistema S preparado em estados arbitrários $|\psi_\alpha\rangle, |\psi_\beta\rangle, \ldots$ com certas especificações de observáveis de F e estados $|\psi_\alpha'\rangle, |\psi_\beta'\rangle, \ldots$ de S satisfazendo exatamente as mesmas especificações de observáveis de F'

Se assumirmos que os dois referenciais são equivalentes então:

$$|\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle|^2 \equiv |\langle\psi_\alpha'|\psi_\beta'\rangle|^2 \quad (1)$$

(2)

se isso não fosse verdade poderíamos usar essas probabilidades para distinguir F e F' e eles não seriam mais equivalentes. Há duas possibilidades (Teorema de Wigner):

$$\langle \psi_\alpha' | \psi_\beta' \rangle = \langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle \quad \text{— transformação unitária}$$

ou

$$\langle \psi_\alpha' | \psi_\beta' \rangle = \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle \quad \text{— transformação anti-unitária}$$

a menos de uma <u>fase global</u>. Há apenas uma simetria importante implementada por uma transformação anti-unitária: a reversão temporal. Não vamos considerá-la agora $\Rightarrow$ trataremos aqui de transformações unitárias unicamente.

Obs: De fato simetrias contínuas devem ter a identidade como um caso limite e logo são representadas por transf. unitárias. No caso de simetrias discretas, essas não precisam ser representadas por transformações unitárias, transf. anti-unitárias são permitidas também.

(a) Teorema de Noether

Se um sistema físico exibe uma simetria sob uma certa transformação, seu Hamiltoniano deve ser invariante sob essa transformação e essa propriedade é conservada no tempo. Dizemos nesse caso que a simetria é exata ou conservada. Nessas circunstâncias o Hamiltoniano deve comutar com o gerador infinitesimal de simetria $\Rightarrow$ o gerador deve ser uma constante de movimento. Esse fato vem diretamente da equação de movimento de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\hat{O}}{dt} = [\hat{O}, \hat{H}] \quad (2)$$

para um observável $\hat{O}(t) = \hat{O}_H$ que não depende explicitamente do tempo. Toda transf. contínua e unitária pode ser escrita como

$$U(\alpha) = e^{i\alpha \hat{G}} \quad (3) \quad , \quad \hat{G}^+ = \hat{G}$$

onde $\hat{G}$ é o gerador da transformação, α é um parâmetro contínuo. Para uma transf infinitesimal

$$\hat{U}(\delta\alpha) = \mathbb{1} + i\delta\alpha\, \hat{G} + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \quad (4)$$

Se um operador $\hat{H} \xrightarrow{\hat{U}} \hat{H} + \delta\hat{H}$

$$\hat{H} + \delta\hat{H} = \hat{U}^+ \hat{H} \hat{U} = (1 - i\delta\alpha\hat{G})\hat{H}(1 + i\delta\alpha\hat{G})$$

$$\simeq \hat{H} - i\delta\alpha \hat{G}\hat{H} + i\delta\alpha \hat{H}\hat{G} = \hat{H} + i\delta\alpha(\hat{H}\hat{G} - \hat{G}\hat{H})$$

$$\delta\hat{H} = -i\delta\alpha\, [\hat{G}, \hat{H}] \quad (5)$$

se $\hat{H}$ é invariante pela transformação, $\delta\hat{H} = 0 \Rightarrow [\hat{G}, \hat{H}] = 0$ e de acordo com (2) $\hat{G}$ é uma constante de movimento.

Todo parâmetro de uma simetria contínua exata tem uma constante de movimento correspondente dada pelo observável que representa o gerador da transformação correspondente.

(a) Translação Espacial

$$T(\vec{a}) = e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{a}}{\hbar}} \quad (6)$$

$\vec{a}$ é um vetor (parâmetros)

$\vec{p}$ = mom. linear total do sistema

$[p_i, p_j] = 0$

como já vimos se $\vec{x}_n$ é o operador de coord. da partícula n

$$T^+(\vec{a})\, \vec{x}_n\, T(\vec{a}) = \vec{x}_n + \vec{a} \qquad (7)$$

se $|\psi\rangle$ é um estado arbitrario

$$T(\vec{a})\,|\psi\rangle = |\psi'\rangle \qquad (8)$$

$$T(\vec{a})\,|\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n\rangle = |\vec{r}_1 + \vec{a} \quad \vec{r}_2 + \vec{a} \quad \ldots \quad \vec{r}_n + \vec{a}\rangle \qquad (9a)$$

$$T^+(\vec{a})\,|\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n\rangle = |\vec{r}_1 - \vec{a} \quad \vec{r}_2 - \vec{a} \quad \ldots \quad \vec{r}_n - \vec{a}\rangle \qquad (9b)$$

$$\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n) = \langle \vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n | \psi\rangle \qquad (10a)$$

$$\psi'(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n) = \langle \vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n | T(\vec{a}) | \psi\rangle \qquad (10b)$$

$$= \langle \vec{r}_1 - \vec{a} \ldots \vec{r}_n - \vec{a} \,|\, \psi\rangle$$

$$= \psi(\vec{r}_1 - \vec{a}, \ldots, \vec{r}_n - \vec{a}) \qquad (10c)$$

mas $T^+ T = 1$ então

$$\psi(\vec{r}_1 \ldots, \vec{r}_n) = \langle \vec{r}_1 \ldots \vec{r}_n \,|\, T^+(\vec{a})\, T(\vec{a}) \,|\, \psi\rangle$$

$$= \langle \vec{r}_1 + \vec{a} \ldots \vec{r}_n + \vec{a} \,|\, \psi'\rangle$$

$$= \psi'(\vec{r}_1 + \vec{a}, \ldots, \vec{r}_n + \vec{a}) \qquad (10d)$$

Caso especial da situação geral: τ é uma transl. que leva o ponto P

ne sua imagem P'

$$P \xrightarrow{\tau} P' \qquad P' = \tau P \qquad |\psi\rangle \xrightarrow{U(\tau)} |\psi'\rangle$$

$$\psi'(P) = \psi(\tau^{-1} P)$$

$$\psi(P) = \psi'(\tau P) = \psi'(P')$$

se o Hamiltoniano de um sistema físico for invariante sob translação espacial $\Rightarrow [p_i, H] = 0$, $\vec{p}$ é o gerador de translações espaciais $\Rightarrow \vec{p}$ é uma constante de movimento.

(b) Grupos de Simetria

Um grupo é uma estrutura algébrica. Um grupo G é um conj. finito ou infinito de elementos $\{g_1, g_2, \ldots\}$ que possui uma lei de composição ($\circ$) tal que:

i) se $g_1 \in g_2 \in G$

$g_1 \circ g_2 = g_1 g_2 \in G \quad \forall g_1, g_2$

ii) $(g_1 \circ g_2) \circ g_3 = g_1 \circ (g_2 \circ g_3) \quad \forall g_1, g_2, g_3 \in G$

iii) $\forall g_i \in G$ existe g_i^{-1} tal que $g_i \circ g_i^{-1} = e$

e é o elemento neutro do grupo, g_i^{-1} é o inverso

iv) $e \circ g_i = g_i \circ e = g_i$

ex: Números inteiros onde $\circ$ é a adição $\equiv \mathbb{Z}$ é o grupo

Números reais onde $\circ$ é a adição $\equiv \mathbb{R}$ é o grupo

Números reais positivos e é a multiplicação $\equiv \mathbb{R}^+$ é o grupo

Matrizes $n \times n$ com elementos reais, determinante não nulo e é a multiplicação

Um grupo é Abeliano se $g_1 \circ g_2 = g_2 \circ g_1 \quad \forall g_1, g_2 \in G$ (elementos comutam)

Grupos de grande interesse para nós, são os chamados Grupos de Lie conexos. Todos os elementos desses grupos podem ser atingidos por um número finito de produtos de elementos do grupo nas vizinhanças da identidade.

Um grupo com um número infinito de elementos é um grupo de Lie se seus elementos puderem ser especificados de forma única por um conj. de parâmetros contínuos $(z_1, z_2, \ldots, z_r)$

De maneira geral, se um operador unitário $U(z_1, \ldots, z_r)$ é responsável por uma transformação de um grupo de Lie, a transformação infinitesimal tem a forma

$$U = 1 - i \sum_{\ell=1}^{r} \delta z_\ell \, g_\ell \quad (11)$$

$g_\ell = g_\ell^+$ são os geradores do grupo

A álgebra obedecida por esses geradores é chamada de Álgebra de Lie

$$[g_a, g_b] = f_{abc} \, g_c \quad (12)$$

f_{abc} = const de estrutura do grupo.

Se a Álgebra não for Abeliana não é direto construir a transformação unitária para valores finitos de todos os parâmetros. Mas o <u>sub-grupo</u> definido por colocar todos os parâmetros $z_i \to 0$, exceto um único $z_\ell \neq 0$ será ainda (um único gerador envolvido)

$$U(z) = e^{-i z g} \quad (13)$$

Vimos que para translações no espaço:

$$T(\vec{a}) = e^{-i \frac{\vec{a} \cdot \vec{p}}{\hbar}}$$

operador unitário de translações espaciais finitas

$$T(\vec{a}) \, T(\vec{b}) = T(\vec{b}) \, T(\vec{a}) = T(\vec{a} + \vec{b})$$

ordem não importa $\longrightarrow$ Grupo Abeliano

$$T(\vec{a})\,T(-\vec{a}) = T(\vec{a})\,T^{+}(\vec{a}) = T(0) = \mathbb{1}$$

$\therefore$ os operadores $T(\vec{a})$ formam um <u>grupo de Lie Abeliano</u> de operadores unitários em correspondência um a um com o grupo de translações no <u>espaço Euclidiano 3D ($\mathcal{E}_3$)</u>

— grupo de translações no $\mathcal{E}_3$: translações ao longo de direções $\neq$s comutam ⟺ <u>correspondência</u>

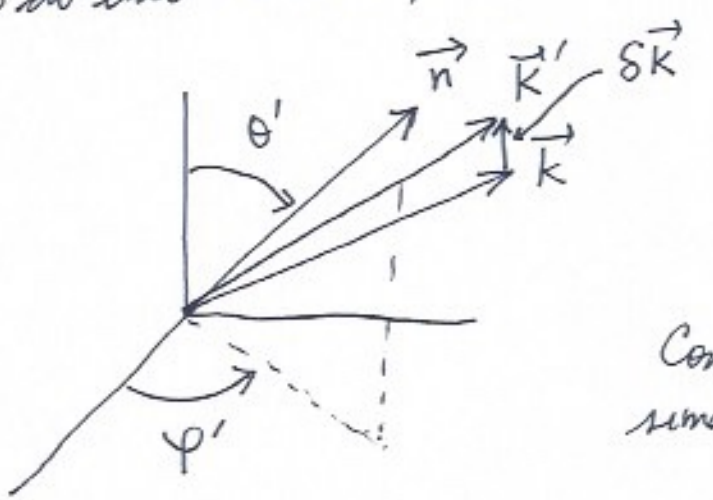
— grupo de operadores unitários no espaço $\mathcal{H}$: $[p_i, p_j] = 0$ (geradores comutam)

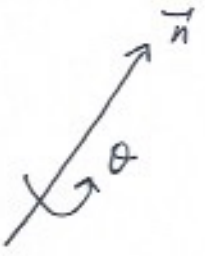
T em $\mathcal{E}_3$ ⟺ $T(\vec{a})$ em $\mathcal{H}$

(c) <u>Rotações</u>

Na M.Q. muitos sistemas físicos são exatamente ou aproximadamente invariantes por rotações. Rotações em torno de eixos distintos não comutam ⟹ o grupo de rotações não é Abeliano

$\mathcal{E}_3$: Podemos parametrizar rotações no $\mathcal{E}_3$ de diversas formas. Uma rotação R será especificada aqui por um versor $\vec{n}$ ao longo do eixo de rotação e um ângulo θ (no sentido anti-horário)





Consideremos uma rotação infinitesimal

$$\delta\vec{\omega} = \delta\theta\,\vec{n} \qquad (14a)$$

$$\vec{k} \longrightarrow \vec{k}' = \vec{k} + \delta\vec{k} = \vec{k} + \delta\vec{\omega} \times \vec{k} \qquad (14b)$$

$$\vec{k}' = R_{\vec{n}}(\delta\theta)\,\vec{k} \quad (14c)$$

$$\delta k_i = \varepsilon_{ijk}\,\delta\omega_j\,k_k = \varepsilon_{ijk}\,\delta\theta\,n_j\,k_k \quad (14d)$$

Se $\vec{k}$ for escrito como um vetor coluna, rotações de qualquer ângulo podem ser realizadas com a ajuda das seguintes matrizes.

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

uma rotação finita de $\vec{k}$ em torno de um único eixo, digamos eixo 1, de um ângulo ϕ_1 é dada por

$$\vec{k} \to \vec{k}' = e^{-i\phi_1 I_1}\,\vec{k} = R_1(\phi_1)\,\vec{k} \quad (14e) \qquad [I_i, I_j] = i\varepsilon_{ijk} I_k$$

M.Q. Para toda rotação R em $\mathcal{E}_3$ associamos um <u>operador unitário</u> $\mathcal{D}(R)$ em $\mathcal{H}$

$$\boxed{R \text{ em } \mathcal{E}_3 \longleftrightarrow \mathcal{D}(R) \text{ em } \mathcal{H}}$$

se $R_2 R_1$ são rotações sucessivas em $\mathcal{E}_3$, então R_1 ocorre 1º e R_2 ocorre depois

$$\Longrightarrow \mathcal{D}(R_2 R_1) = \mathcal{D}(R_2)\,\mathcal{D}(R_1) \quad (15)$$

rotações em $\mathcal{E}_3$ não comutam

$$\Longrightarrow \mathcal{D}(R_2)\,\mathcal{D}(R_1) \neq \mathcal{D}(R_1)\,\mathcal{D}(R_2)$$

Mas rotações em torno de um único eixo $\vec{n}$ comutam, tais rotações podem ser escritas como

$$\mathcal{D}(R) = e^{-i\theta \vec{n}.\vec{J}} \qquad (16)$$

$\vec{n}.\vec{J}$ é por <u>definição</u> a <u>componente do momento angular ao longo do eixo $\vec{n}$</u>

Considere duas rotações infinitesimais sucessivas em torno de dois eixos diferentes $(\delta\phi_1, \delta\phi_2)$ em $\mathcal{E}_3$

$$\vec{k}' \overset{(14e)}{=} (1 - i\,\delta\phi_2 I_2 + \dots)(1 - i\,\delta\phi_1 I_1 + \dots)\vec{k}$$

$$\vec{k}'' = (1 - i\,\delta\phi_1 I_1 + \dots)(1 - i\,\delta\phi_2 I_2 + \dots)\vec{k}$$

$$\vec{k}'' - \vec{k}' = [-\delta\phi_1 \delta\phi_2 (I_1 I_2 - I_2 I_1) + \dots]\vec{k}$$

$$= [-i\,\delta\phi_1 \delta\phi_2 I_3 + \varphi(\delta\phi^3)]\vec{k}$$

A correspondência com os operadores unitários $\mathcal{D}(R)$ em $\mathcal{H}$ deve manter essa diferença

$$\lim_{\delta\phi_i \to 0} \left(e^{-i\delta\phi_1 J_1} e^{-i\delta\phi_2 J_2} - e^{-i\delta\phi_2 J_2} e^{-i\delta\phi_1 J_1} \right)$$

$$= -i\,\delta\phi_1 \delta\phi_2 J_3 + \varphi(\delta\phi^3)$$

$$\therefore \; [J_1, J_2] = i J_3$$

ou de maneira geral

$$[J_i, J_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,J_k \quad (17)$$

que é a Álgebra dos geradores de rotação (operadores de Momento Angular) em M.Q.

Seja A um observável qualquer. Sob rotação R

$$A \longrightarrow D^{+}(R)\,A\,D(R) \equiv A' \quad (18a)$$

se R for infinitesimal $A' = A + \delta A$ (18b)

$$\delta A = i\,\delta\theta\,[\vec{n}.\vec{J}, A] \quad (18c)$$

$\Rightarrow$ se um observável for invariante sob rotação em torno de um eixo $\vec{n}$, ele comuta com a componente do momento angular ao longo desse eixo.

Um observável que é invariante sob rotação em qualquer direção é chamado de escalar sob rotação - operador escalar

Se H for invariante sob rotação em torno de um eixo, a componente do momento angular total ao longo desse eixo é uma constante de movimento (Veja (2))

De maneira geral, qualquer observável $\vec{V} = (V_1, V_2, V_3)$ que se transforma como $\vec{K}$

$$\vec{V} \longrightarrow \vec{V}' = \vec{V} + \delta\vec{V} \quad (19)$$

$$\delta\vec{V} \underset{(18c)}{=} i\,\delta\theta\,[\vec{n}.\vec{J}, \vec{V}] \underset{(14b)}{=} \delta\theta\,\vec{n}\times\vec{V} \quad \text{(Veja 14b)}$$

$$\delta V_j = i\,\delta\theta\, n_e\, [J_e, V_j]$$
$$= \delta\theta\, \varepsilon_{jem}\, n_e\, V_m$$

$$\therefore \underline{[V_i, J_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\, V_k} \quad (20)$$

(20) é a regra que define um <u>operador vetorial</u>. $\vec{J}$ é um operador vetorial!

- $\vec{P}$ o momento total do sistema, sendo um operador vetorial não comuta com $\vec{J}$, apenas componentes de $\vec{P}$ e $\vec{J}$ na mesma direção comutam
- $\vec{P}.\vec{J}$, J^2, P^2 (operadores escalares) comutam com $\vec{J}$. Embora todas as componentes de $\vec{J}$ e $\vec{P}$ sejam constantes de movimento se H for invariante sob rotação e translação, não podem ser diagonalizados simultaneamente. Tradicionalmente tomamos J_z para ser diagonalizado simultaneamente com os escalares por rotação

Sob rotação R os vetores de estado e função de onde se transformam por:

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle \equiv \mathcal{D}(R)\,|\psi\rangle$$
$$|\vec{r}\rangle \longrightarrow |R\vec{r}\rangle \equiv \mathcal{D}(R)\,|\vec{r}\rangle$$

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r}) \longrightarrow \langle\vec{r}|\mathcal{D}(R)|\psi\rangle = \langle R^{-1}\vec{r}|\psi\rangle$$
$$= \psi(R^{-1}\vec{r})$$
$$= \psi'(\vec{r})$$

(d) Reflexão Espacial e Paridade

Simetrias discretas podem ser unitárias ou anti-unitárias. Elas não podem ser representadas por geradores infinitesimais (que não existem!) mas diretamente pelos operadores de transformação.

Uma das principais simetrias discretas, representada por operador unitário, é a simetria de reflexão: $\vec{r} \longrightarrow -\vec{r}$

Em $\mathcal{E}_3$ chamamos de <u>vetores polares</u> aqueles que se transformam como $\vec{r}$ sob reflexão e <u>vetores axiais</u> aqueles que não mudam de sinal sob reflexão:

ex: $\vec{p} \longrightarrow -\vec{p}$, $\vec{E} \to -\vec{E}$ são vetores polares

$\vec{J} \to \vec{J}$, $\vec{B} \to \vec{B}$ são vetores axiais

$\vec{E} \cdot \vec{B}$ é um invariante sob rotação, mas muda de sinal sob reflexão $\Longrightarrow$ é um pseudo-escalar.

Na M.Q. a reflexão espacial será implementada pelo operador unitário I_s:

$$I_s^+ \, \vec{x}_n \, I_s = -\vec{x}_n$$

$$I_s^+ \, \vec{p}_n \, I_s = -\vec{p}_n$$

mas $I_s^+ \, \vec{J} \, I_s = \vec{J}$ para qualquer momento angular

Seja $|\psi\rangle$ um vetor de estado que é auto-estado do operador I_s

$$I_s|\psi\rangle = s|\psi\rangle \qquad \text{mas } I_s^2 = \mathbb{I} \Longrightarrow s = \pm 1 \begin{cases} \nearrow \text{par} \\ \searrow \text{ímpar} \end{cases}$$

$$I_s^+ = I_s$$

esse número quântico é chamado de paridade.

Se H for invariante por reflexão espacial, paridade é uma constante de movimento e auto-estados de energia podem ter paridade bem definida (par ou ímpar)

$$H \equiv I_s^+ H I_s = I_s H I_s \Longrightarrow [H, I_s] = 0 \Longrightarrow \frac{dI_s}{dt} = 0$$

Pode acontecer, e acontece para o átomo de hidrogênio, que autoestados de energia de paridades diferentes sejam degenerados $\Rightarrow$ combinação linear de estados de paridades $\neq s$ são também auto-estados de energia.

Paridade é um número quântico multiplicativo

$$|\psi\rangle = |\psi(s_1)\rangle \otimes \ldots \otimes |\psi(s_N)\rangle$$

Conjunto de N sistemas não interagentes

$$s = \prod_k s_k$$