# Simetrias e Leis de Conservação na Mecânica Quântica



Aula 14

Em Mecânica Quântica, uma transformação de simetria é tal que ela deixa a probabilidade invariante.

Por exemplo, se o sistema está num estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de uma medição resultar num autovalor $\omega_i$ de autoestado $|\omega_i\rangle$ é

$$P(\omega_i) \propto |\langle\omega_i|\psi\rangle|^2$$

Se a transformação de simetria deve preservar $P(\omega_i)$ temos 2 possibilidades.

1. Preserva o produto interno

i.e. $\langle\omega_i|\psi\rangle \longrightarrow \langle\omega_i|\psi\rangle$

$\Rightarrow$ A transformação é unitária

$$|\psi\rangle \longrightarrow U|\psi\rangle$$

$$|\omega_i\rangle \longrightarrow U|\omega_i\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\omega_i|\psi\rangle \longrightarrow \langle\omega_i|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\omega_i|\psi\rangle$$

se $U^\dagger U = \mathbb{1} \Rightarrow U^\dagger = U^{-1} \rightarrow$ transformação é unitária (e linear).

2. Transformação é Anti-unitária (e anti-linear)

I.e.:

$$\langle w_i|\psi\rangle \longrightarrow \langle w_i|\psi\rangle^* = \langle\psi|w_i\rangle$$

$$\left.\begin{array}{l} |\psi\rangle \longrightarrow A|\psi\rangle \\ |w_i\rangle \longrightarrow A|w_i\rangle \end{array}\right\} \Rightarrow \langle w_i|\psi\rangle \longrightarrow \langle w_i|A^\dagger A|\psi\rangle$$

Mas agora $A^\dagger$ é definido de forma diferente

Vamos nos concentrar no caso 1 (o caso 2 só é aplicado a reflexão temporal, $t \Rightarrow -t$).

Em particular, estamos interessados em transformações unitárias e lineares que possam estar arbitrariamente perto da identidade. Por exemplo

$$U = \mathbb{1} + i\varepsilon G + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

, G operador que não depende de $\varepsilon$.

Impondo unitariedade

$$U^\dagger U = \mathbb{1} = (1 - i\varepsilon G^\dagger)(1 + i\varepsilon G)$$

$$= 1 - i\varepsilon G^\dagger + i\varepsilon G + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = \mathbb{1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Se $\boxed{G = G^\dagger} \Rightarrow$ G deve ser hermitiano

Generalizando para uma transformação finita, fazemos

$$\varepsilon = \frac{\Theta}{N} \quad \text{onde } \Theta \text{ é finito}$$

então N transformações infinitesimais são

$$(1 + i\varepsilon G)^N = \left(1 + i\frac{\Theta}{N} G\right)^N$$

no limite $N \to \infty$

$$\left(1 + i\frac{\Theta}{N} G\right)^N \longrightarrow \boxed{e^{i\Theta G} = U}$$

transformação finita.

—— o —— o ——

## Simetria de Translação

Se refere à transformação obtida por um deslocamento de posição.

Se começamos com uma translação infinitesimal

$$\vec{x} \longrightarrow \vec{x} + d\vec{x}$$

Queremos definir um operador unitário T atuando no estado $|\vec{x}\rangle$:

$T(d\vec{x})$ pela ação no estado da posição $|\vec{x}\rangle$:

$$T(d\vec{x})|\vec{x}\rangle = |\vec{x}+d\vec{x}\rangle$$

$\Rightarrow$ $|\vec{x}\rangle$ e $|\vec{x}+d\vec{x}\rangle$ são autovetores do operador posição $\vec{X}$, mas com autovalores diferentes.

$\Rightarrow$ $\boxed{|\vec{x}\rangle \text{ não é autovetor de } T}$

Se considerarmos um estado qualquer $|\psi\rangle$:

$$T(d\vec{x})|\psi\rangle = T(d\vec{x})\int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\psi\rangle$$

$$= \int d^3x'\,|\vec{x}'+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}'|\psi\rangle$$

MAS: o lado direito também pode ser escrito como

$$\int d^3x'\,|\vec{x}'+d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}'|\psi\rangle = \int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'-d\vec{x}|\psi\rangle$$

Isto porque podemos trocar de variável de integração

$\vec{x}'' = \vec{x}'+d\vec{x} \Rightarrow \vec{x}' = \vec{x}''-d\vec{x}$, integrar em $\vec{x}''$.

# Propriedades do Operador T

- Claramente, tal como vimos genericamente, T deve ser unitário para preservar o produto escalar, em particular a norma.

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | T^{\dagger}(d\vec{x})\, T(d\vec{x}) | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{T^{\dagger}(d\vec{x}) = T^{-1}(d\vec{x})}$$

- Duas translações sucessivas, $d\vec{x}_1$ e $d\vec{x}_1$ devem resultar no mesmo que uma translação $d\vec{x}_1 + d\vec{x}_2$.

$$\Rightarrow \quad \boxed{T(d\vec{x}_2)\, T(d\vec{x}_1) = T(d\vec{x}_1 + d\vec{x}_2)}$$

- Deve satisfazer que (pensar um pouco!)

$$T(-d\vec{x}) = T^{-1}(d\vec{x})$$

- Finalmente, para $d\vec{x} \to 0$ deve ser que $T(d\vec{x}) \to \mathbb{1}$:

$$\boxed{\lim_{d\vec{x} \to 0} T(d\vec{x}) = 1}$$

Para translações infinitesimais $d\vec{x}$ então podemos escrever

$$T(d\vec{x}) = \mathbb{1} - i d\vec{x}\cdot\vec{G}$$

onde $\vec{G}$ é um operador vetor tal que $G_x$, $G_y$ e $G_z$ são hermitianos.

É fácil verificar que essa forma de $T(d\vec{x})$ satisfaz todas as propriedades necessárias. (lista).

Mas quem é $\vec{G}$, o operador vetor "gerador" das translações? Para responder essa pergunta primeiro observamos que

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{X}\, T(d\vec{x}) |\vec{x}\rangle &= \vec{X}\, |\vec{x} + d\vec{x}\rangle \\ &= (\vec{x} + d\vec{x}) |\vec{x} + d\vec{x}\rangle \end{aligned} \right\}$$

Por outra parte,

$$\left\{ \begin{aligned} T(d\vec{x})\, \vec{X} |\vec{x}\rangle &= T(d\vec{x})\, \vec{x} |\vec{x}\rangle \\ &= \vec{x}\, T(d\vec{x}) |\vec{x}\rangle \\ &= \vec{x}\, |\vec{x} + d\vec{x}\rangle \end{aligned} \right\}$$

$$\Rightarrow \left[\vec{X}, T(d\vec{x})\right]|\vec{x}\rangle = d\vec{x}\,|\vec{x}+d\vec{x}\rangle$$

Mas

$$d\vec{x}\,|\vec{x}+d\vec{x}\rangle \simeq d\vec{x}\,|\vec{x}\rangle + \mathcal{O}(d\vec{x}^2)$$

Para ver isto com calma, podemos projetar na base $\{|x\rangle\}$ e expandir em Taylor ao redor de $\vec{x}$:

$$|\vec{x}+d\vec{x}\rangle \longrightarrow \psi(\vec{x}+d\vec{x}) \simeq \psi(\vec{x}) + \psi'(\vec{x})|dx| + \dots$$

$$\Rightarrow |d\vec{x}|\,\psi(\vec{x}+d\vec{x}) \simeq |d\vec{x}|\,\psi(\vec{x}) + |d\vec{x}|^2\psi'(\vec{x}) + \dots$$

$$\Rightarrow \left[\vec{X}, T(d\vec{x})\right]|\vec{x}\rangle = d\vec{x}\,|\vec{x}\rangle + \mathcal{O}(|d\vec{x}|^2)$$

e portanto temos a identidade

$$\boxed{\left[\vec{X}, T(d\vec{x})\right] = d\vec{X}}$$

Usando a forma infinitesimal de $T(d\vec{x})$ temos

$$\left[\vec{X}, (1 - i\,d\vec{x}.\vec{G})\right] = d\vec{X}$$

$$-i\vec{X}\,d\vec{x}.\vec{G} + i\,d\vec{x}.\vec{G}\vec{X} = d\vec{X}$$

Escolhendo

$$d\vec{x} = dx\,\hat{x}_j \equiv$$

obtemos

$$-i\,X_i\,G_j\,dx\,\hat{x}_j + i\,dx\,\hat{x}_j\,G_j\,X_i = dx\,\hat{x}_j\,\delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \boxed{[X_i, G_j] = i\,\delta_{ij}}$$

⇒ Claramente temos que o operador vetor gerador das translações é o momento (linear)/$\hbar$

$$\boxed{G_j = \frac{P_j}{\hbar}}$$

tal que obtemos a relação de comutação

$$[X_i, P_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

Então o operador translação (infinitesimal) é

$$\boxed{T(d\vec{x}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot d\vec{x}}$$

For finite translations $\vec{x}$ we have

$$\boxed{T(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{x}}}$$

onde aqui $\vec{x}$ é o vetor posição (não o operador vetor posição) mas $\vec{P}$ é o operador momento.

---

## Invariância do Hamiltoniano:

Na representação de Heisenberg, uma transformação com a translação deixa o Hamiltoniano invariante se

$$U^{\dagger} H U = H$$

isto, porque passando da descrição de Schrödinger para a de Heisenberg é dado por, eg:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi|U^{\dagger} H U|\psi\rangle$$

quando fazemos

$$|\psi\rangle \longrightarrow U|\psi\rangle$$

Então se queremos invariância, impomos

$$\langle\psi|U^{\dagger} H U|\psi\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle$$

MAS

$$U^{+} H U = H$$

é equivalente a

$$H U = U H \quad \text{dado que } U^{+} = U^{-1}$$

$$\Rightarrow \quad [H, U] = 0$$

A expansão de $U = 1 + i\varepsilon G$

$$\Rightarrow \quad [H, 1 + i\varepsilon G] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{[G, H] = 0} \Rightarrow \boxed{\frac{dG}{dt} = 0}$$

$\Rightarrow$ Se uma transformação de simetria deixa o Hamiltoniano invariante, o gerador G associado a ela é uma grandeza conservada.

$\Rightarrow$ { G é um operador associado a um observável conservado }

No caso específico das translações, vemos que o gerador é o vetor operador momento $\vec{P}$, e portanto se H é invariante sob translações então

$$[\vec{P}, H] = 0 \Rightarrow \boxed{\frac{d\vec{P}}{dt} = 0}$$

## Simetria de Rotação:

### Rotações em Duas Dimensões

Classicamente, a operação de rotação por um ângulo $\phi$ em 2D pode ser descrita como uma operação num vetor $\vec{v}$

$$\vec{V}' = R(\phi)\vec{V}$$

Se escrevemos os vetores como colunas, então $R(\phi)$ é uma matriz de 2x2:

$$\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi \\ \operatorname{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix}$$

Onde vemos que $R(\phi)$ satisfaz

$$R^{\dagger}(\phi) R(\phi) = \mathbb{1}_{2\times 2}$$

sendo que a verdade é que $R^{\dagger}(\phi) = R^{T}(\phi)$ dado que R é real.

De fato essa seria uma rotação no plano x-y e portanto é uma rotação aredor do eixo $\hat{z}$.

Os vetores podem ser, por exemplo, $\vec{x}$ ou $\vec{p}$.

Em Mecânica Quântica, $R(\phi)$ é um operador atuando no espaço de Hilbert. Ele atua no estado $|\psi\rangle = |\vec{x}\rangle = |x, y\rangle$ tal que

$$R(\phi)|x, y\rangle = |x\cos\phi - y\,\mathrm{sen}\,\phi,\ x\,\mathrm{sen}\,\phi + y\cos\phi\rangle$$

Rotação Infinitesimal $(\phi = \varepsilon \ll 1)$

$$\cos\phi \simeq 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} + \dots \quad ; \quad \mathrm{sen}\,\phi \simeq \varepsilon + \dots$$

Em $\Theta(\varepsilon)$, temos então:

$$R(\varepsilon)|x, y\rangle = |x - y\varepsilon,\ x\varepsilon + y\rangle$$

$\Rightarrow$ Se quisermos calcular a ação de $R(\varepsilon)$ num estado $|\psi\rangle$

$$R(\varepsilon)|\psi\rangle = R(\varepsilon)\int dx\,dy\,|x, y\rangle\langle x, y|\psi\rangle$$

$$R(\varepsilon)|\psi\rangle = \int dx\,dy\,|x - y\varepsilon,\ x\varepsilon + y\rangle\langle x, y|\psi\rangle$$

Mas podemos mudar de variáveis de integração (tal e como fizemos para $T(\varepsilon)$):

$$\left.\begin{aligned} x' &= x - y\varepsilon \\ y' &= x\varepsilon + y \end{aligned}\right\} \Rightarrow dx'\,dy' \doteq J(\varepsilon)\,dx\,dy$$

Mas o Jacobiano é $\det\begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} = 1 + \varepsilon^2 \simeq 1$

$$\Rightarrow dx'\,dy' \doteq dx\,dy\,(1 + O(\varepsilon^2))$$

$$\Rightarrow R(\varepsilon)|\psi\rangle = \int dx'\,dy'\,|x', y'\rangle\langle x' + (y' + x\varepsilon)\varepsilon,\ y' - (x' + y\varepsilon)\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= \int dx'\,dy'\,|x', y'\rangle\,\psi(x' + \varepsilon y',\ y' - \varepsilon x')$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle x, y|R(\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(x + \varepsilon y,\ y - \varepsilon x)}$$

Se agora escrevemos o operador $R(\varepsilon)$ como

$$R(\varepsilon) = \mathbb{1} + i\epsilon G$$

onde $G$ é o operador gerador de rotação infinitesimal $\varepsilon$ ao redor de $\hat{z}$, vemos que

$$\langle x,y|\mathbb{1} + i\varepsilon G|\psi\rangle = \psi(x+\varepsilon y, y-\varepsilon x)$$

Expandindo o lado direito em Taylor:

$$\langle x,y|\psi\rangle + i\varepsilon\langle x,y|G|\psi\rangle$$

$$= \psi(x,y) + \frac{\partial\psi}{\partial x}(\varepsilon y) + \frac{\partial\psi}{\partial y}(-\varepsilon x)$$

$$\Rightarrow i\langle x,y|G(\varepsilon)|\psi\rangle = \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x,y)$$

ou $$-\hbar\langle x,y|G(\varepsilon)|\psi\rangle = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,y)$$

$$\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad -\hbar\, G(\varepsilon) = X P_y - Y P_x$$

ou

$$\boxed{G(\varepsilon) = -\frac{L_z}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{R(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon L_z}$$

o operador $L_z$ é o gerador das rotações aredor do eixo $\hat{z}$.

$$\Rightarrow \text{ Se } \quad R^{\dagger}_{(\varepsilon)} H R = H \Rightarrow [L_z, H] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{dL_z}{dt} = 0}$$

Para rotações finitas aredor de $\hat{z}$ por um ângulo $\phi$ temos

$$\boxed{R(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} L_z \phi}}$$

Em geral, se a rotação é ao redor de um eixo $\hat{n}$

$$\boxed{R(\phi \hat{n}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{L}\cdot\hat{n}\phi}}$$