# Simetrias na Mecânica Quântica

Prof. Emerson Passos

26 de maio de 2010

# Definição de Simetria na Mecânica Quântica

- $G(a)$ elemento de um grupo $\mathcal{G}$ de transformações contínuas,

$$G(a) \stackrel{\text{M.Q.}}{\rightarrow} \hat{T}(G(a)),$$

  $\hat{T}(G(a))$ operador unitário.

- Invariância da Hamiltoniana pelas transformações de $\mathcal{G}$,

$$\hat{T}^{\dagger}(G(a))\hat{H}\hat{T}(G(a)) = \hat{H} \quad \Rightarrow \quad [\hat{T}(G(a)), \hat{H}] = 0,$$

  para qualquer elemento $G(a)$ do grupo $\mathcal{G}$. Nesse caso dizemos que $\mathcal{G}$ é um **grupo de simetria** da Hamiltoniana.

$\mathcal{G}$ grupo que depende de $r$ parâmetros, $a_1, a_2, \ldots, a_r$.

- Limite de uma transformação infinitesimal:

$$\hat{T}(G(a)) \cong 1 - i\sum_{k=1}^{r} a_k \hat{x}_k,$$

$\hat{x}_k$ operador hermiteano, **gerador do grupo** $\mathcal{G}$.

- Condição de invariância se reduz à, $[\hat{H}, \hat{x}_k] = 0$. Em virtude das equações de Heisenberg, $i\hbar\frac{d\hat{x}_k}{dt}(t) = [\hat{x}_k(t), \hat{H}]$, temos que $\hat{x}_k(t)$ é uma constante do movimento, $\frac{d\hat{x}_k}{dt}(t) = 0$. Análogo ao caso de rotações e translações. Operador momento gerador das translações. Operador momento angular gerador das rotações. Invariância da Hamiltoniana por essas transformações, implica que esses observáveis são constantes do movimento.

- Propiedade das constantes de movimento.
$|g_k\rangle$ autovetor de $\hat{x}_k$ com autovalor $g_k$, $\hat{x}_k|g_k\rangle = g_k|g_k\rangle$.
Suponha que no instante $t_0$ o sistema esteja no estado $|g_k\rangle$.
Se $\hat{x}_k$ é uma constante do movimento, $[\hat{H}, \hat{x}_k] = 0$, o estado do sistema no instante $t$ é um autovetor de $\hat{x}_k$ com o mesmo autovalor:

$$|g_k, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|g_k\rangle \quad \text{e} \quad \hat{x}_k|g_k, t\rangle = g_k|g_k, t\rangle.$$

- Se $|E\rangle$ é um autovetor de $\hat{H}$ com autovalor $E$, $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$, os vetores de estado $\hat{T}(G(a))|E\rangle$ são autovetores de $\hat{H}$ com o mesmo autovalor,

$$\hat{H}\hat{T}(G(a))|E\rangle = \hat{T}(G(a))\hat{H}|E\rangle = E\hat{T}(G(a))|E\rangle.$$

- Espaço dos vetores de estado degenerados $\hat{T}(G(a))|E\rangle$ invariante pela ação dos operadores do grupo, o que define uma **representação** do grupo. Essa representação, em geral, é uma **representação irredutível** indicando que a ordem da degenerescência é igual a dimensão das representações irredutíveis.

Exemplo: *Grupo das Rotações, $O(3)$.*

a) *Elementos do grupo:* matrizes ortogonais, $R(\phi, \mathbf{n})$, que dependem de três parâmetros.

b) *Correspondência com a M.Q.:*

$$R(\phi, \mathbf{n}) \stackrel{M.Q.}{\rightarrow} \hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n})) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi \hat{\mathbf{J}}\cdot\mathbf{n}}.$$

c) *Invariância da Hamiltoniana:*

$$\hat{\mathcal{D}}^{\dagger}(R(\phi, \mathbf{n}))\hat{H}\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n})) = \hat{H}.$$

d) *Geradores do grupo:*

$$\hat{\mathcal{D}}(R(d\phi, \mathbf{n})) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\phi \, \hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n}.$$

e) *Constantes do movimento:* $[\hat{J}_k, \hat{H}] = 0$.

f) Degenerescência dos níveis de energia como consequência da invariância rotacional. Se $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$, $\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n}))|E\rangle$ são autovetores de $\hat{H}$ com mesmo autovalor. $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{J}}^2$ e $\hat{J}_z$ conjunto completo de observáveis compatíveis,

$$\hat{H}|Ejm\rangle = E|Ejm\rangle, \quad \hat{\mathbf{J}}^2|Ejm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|Ejm\rangle, \quad \hat{J}_z|Ejm\rangle = \hbar m|Ejm\rangle.$$

Em geral, estados degenerados são autovetores de $\hat{\mathbf{J}}^2$ com o mesmo autovalor:

$$\hat{\mathbf{J}}^2\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n}))|E\rangle = \hbar^2 j(j+1)\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n}))|E\rangle.$$

Então de

$$\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n}))|E\rangle = \sum_m |Ejm\rangle\langle jm|\hat{\mathcal{D}}(R(\phi, \mathbf{n}))|E\rangle,$$

concluímos que a ordem da degenerescência é igual a $2j+1$. A dimensão da representação irredutível de momento angular igual a $j$. Note que como os estados $|Ejm\rangle$ são degenerados, os níveis de energia não dependem de $m$.

Na Mecânica Quântica, propriedades de simetria associadas não só a transformações contínuas (translação, rotação) mas a transformações discretas (inversão espacial, inversão temporal) são igualmente importantes.

1. **Inversão espacial:** Reflexão do sistema em torno de um ponto, identificado com a origem do sistema de coordenadas.
   - Inversão espacial $\rightarrow$ operador unitário no espaço de vetores de estado, o **operador paridade**:

     $$|\alpha\rangle_\pi = \hat{\pi}|\alpha\rangle, \quad \hat{\pi}^\dagger\hat{\pi} = \hat{\pi}\hat{\pi}^\dagger = \hat{1}.$$

     Ação de $\hat{\pi}$ nos vetores de estado:

     $$|\langle\mathbf{x}|\alpha\rangle_\pi|^2 = |\langle-\mathbf{x}|\alpha\rangle|^2 \rightarrow \text{escolha de fase } \langle\mathbf{x}|\alpha\rangle_\pi = \langle-\mathbf{x}|\alpha\rangle.$$

     Consequência:

     $${}_\pi\langle\alpha|\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle_\pi = -\langle\alpha|\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle \quad \text{igual a} \quad \langle\alpha|\hat{\pi}^\dagger\hat{\mathbf{x}}\hat{\pi}|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle$$

     Como igualdade válida para qualquer $|\alpha\rangle$,

     $$\hat{\pi}^\dagger\hat{\mathbf{x}}\hat{\pi} = -\hat{\mathbf{x}}.$$

De $\langle \mathbf{x}|\hat{\pi}|\alpha\rangle = \langle -\mathbf{x}|\alpha\rangle$ vemos que $\hat{\pi}^2 = \hat{1}$, consequentemente $\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$, mostrando que $\hat{\pi}$ éum operador hermitiano.Concluindo, determinamos como o operador posição se transforma por inversão espacial.

- **Como o operador momento se transforma por inversão espacial?**

$$\hat{\pi}\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{T}(-\mathbf{a})\hat{\pi}, \quad \hat{T}(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}}, \quad \text{então} \quad \hat{\pi}^\dagger\hat{\mathbf{p}}\hat{\pi} = -\hat{\mathbf{p}}.$$

- **Transformação do operador momento angular:**
Momento angular orbital, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\pi}^\dagger\hat{\mathbf{L}}\hat{\pi} = \hat{\mathbf{L}}$.
Spin se transforma do mesmo modo, $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, $\hat{\pi}^\dagger\hat{\mathbf{J}}\hat{\pi} = \hat{\mathbf{J}}$.
Como no caso da translação podemos deduzir como o operador momento angular se transforma por rotações verificando que

$$\hat{\pi}\hat{\mathcal{D}}(R) = \hat{\mathcal{D}}(R)\hat{\pi}.$$

Classificação dos operadores de acordo com:

i) As propriedades de transformação por inversão espacial:

   a) $\hat{\pi}^\dagger \hat{A} \hat{\pi} = \hat{A}$, $\hat{A}$ operador **par** por inversão espacial.
   b) $\hat{\pi}^\dagger \hat{A} \hat{\pi} = -\hat{A}$, $\hat{A}$ operador **ímpar** por inversão espacial.

ii) As propriedades de transformação por rotações:

   a) $\hat{\mathcal{D}}^\dagger(R) \hat{O} \hat{\mathcal{D}}(R) = \hat{O}$, $\hat{O}$ operador **escalar** por rotações.
   b) $\hat{\mathcal{D}}^\dagger(R) \hat{V}_k \hat{\mathcal{D}}(R) = \sum_l R_{kl} V_l$, $\hat{\mathbf{V}}$ operador **vetorial** por rotações.

- Operadores escalares, pares por inversão espacial, operadores escalares, ímpares por inversão espacial: *pseudo-escalares*.
- Operadores vetoriais ímpares por inversão espacial, *operadores vetoriais polares*. Operadores vetoriais pares por inversão espacial, *operadores vetoriais axiais ou pseudo-vetores*.

# Autovetores e autovalores do operador paridade

Equação de autovalores: $\hat{\pi}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$.
Como $\hat{\pi}^2 = \hat{1}$, autovalores iguais a $\pm 1$.

- Função de onda de um vetor de estado de paridade positiva $\rightarrow$ função par de $\mathbf{x}$;
- Função de onda de um vetor de estado de paridade negativa $\rightarrow$ função ímpar de $\mathbf{x}$.

Prova dessa propriedade,

$$\hat{\pi}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle, \quad \langle\mathbf{x}|\hat{\pi}|\alpha\rangle = \lambda\langle\mathbf{x}|\alpha\rangle, \quad \psi_\alpha(-\mathbf{x}) = \lambda\psi_\alpha(\mathbf{x}).$$

Então se $\lambda = 1$, $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ é uma função par de $\mathbf{x}$, se $\lambda = -1$, uma função ímpar de $\mathbf{x}$.

Exemplo: *Hamiltoniana invariante por rotações e por inversão espacial* Vamos considerar uma partícula num campo central. $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ e $\hat{L}_z$ conjunto completo de observáveis que comutam.Operador paridade compatível com esses observáveis. A função de onda dos estados estacionários é:

$$\langle \mathbf{x}|Elm\rangle = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

e

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\pi}|Elm\rangle = \langle -\mathbf{x}|Elm\rangle = R_{El}(r)Y_{lm}(\pi-\theta, \phi+\pi) = (-1)^l R_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \phi).$$

que é igual a ,

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\pi}|Elm\rangle = (-1)^l\langle \hat{\vec{x}}|Elm\rangle.$$

Assim podemos concluir que $\hat{\pi}|Elm\rangle = (-1)^l|Elm\rangle$ mostrando que estados com $l$ par tem paridade positiva, ímpar, negativa.

# Degenerescência:

Mostre que se $[\hat{H}, \hat{\pi}] = 0$ e $|E_n\rangle$ um autovetor de $\hat{H}$, $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ temos:

a) Se $|E_n\rangle$ é um autovetor não-degenerado, $|E_n\rangle$ é um autovetor do operador paridade.
Prova: De $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ segue que $\hat{H}\hat{\pi}|E_n\rangle = E_n\hat{\pi}|E_n\rangle$, isto é, $|E_n\rangle$ e $\hat{\pi}|E_n\rangle$ são autoestados de $\hat{H}$ com mesmo autovalor.
Como $E_n$ autovalor não-degenerado estados devem ser idênticos:

$$\hat{\pi}|E_n\rangle = \lambda|E_n\rangle, \quad \lambda = \pm 1.$$

b) $E_n$ um autovalor degenerado. Procedendo como em a) concluimos que $\hat{\pi}|E_n\rangle$ é autovetor com o mesmo autovalor.
Nesse caso existem duas possibilidades:

1. $|E_n\rangle$ e $\hat{\pi}|E_n\rangle$ os mesmos estados. $|E_n\rangle$ um autovetor do operador paridade, $\hat{\pi}|E_n\rangle = \lambda|E_n\rangle$, $\lambda = \pm 1$.
2. $|E_n\rangle$ e $\hat{\pi}|E_n\rangle$ linearmente independentes. Podemos construir combinações lineares desses dois estados de modo que sejam autoestados de $\hat{\pi}$:

$$|\pm E\rangle = \frac{\hat{P}_\pm|E\rangle}{\langle E|\hat{P}_\pm|E\rangle^{1/2}},$$

$\hat{P}_+$, $\hat{P}_-$ projetores nos estados de paridade positiva e negativa, respectivamente.

$$\hat{P}_\pm = \frac{1 \pm \hat{\pi}}{2}.$$

Exemplo 1: *Partícula livre*

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad [\hat{H}, \hat{\pi}] = 0, \quad [\hat{p}, \hat{\pi}] \neq 0,$$

$\hat{p}$ e $\hat{\pi}$ observáveis incompatíveis. Auto-estados de $\hat{p}$ não são, em geral, auto-estados de $\hat{\pi}$,

$$\hat{\pi}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle,$$

$|\mathbf{p}\rangle$ e $|-\mathbf{p}\rangle$ são estados degenerados e podemos construir auto-estados de $\hat{\pi}$ e $\hat{H}$ como mostrado acima.

Exemplo 2: *Poço duplo simétrico*

$$\hat{H}|S\rangle = E_S|S\rangle, \quad \hat{H}|A\rangle = E_A|A\rangle, \quad |\psi_{S,A}(x)|^2 = |\psi_{S,A}(-x)|^2$$

- $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle)$, concentrado à direita,
- $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle)$, concentrado à esquerda.

$$\hat{\pi}|R\rangle = |L\rangle$$

Vetor de estado no instante $t$ se o sistema está no estado $|R\rangle$ no instante inicial:

$$|R,t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_S t}|S\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_A t}|A\rangle).$$

Probabilidade de achar a partícula no estado $|R\rangle$ no instante $t$:

$$|\langle R|R,t\rangle|^2 = \cos^2\frac{\pi t}{T_0}, \qquad T_0 = 2\pi\frac{\hbar}{E_A - E_S}.$$

- Tunelamento através da barreira. Tempo inversamente proporcional à diferença de energia. Exemplo: molécula de amônia.
- Altura da barreira $\to \infty$. Autovetores degenerados. Estado fundamental não necessariamente autovetor de $\hat{\pi}$. Quebra espontânea de simetria. Estados $|R\rangle$ e $|L\rangle$ auto-estados degenerados. Exemplo: moléculas orgânicas, isômeros óticos. $T_0 \approx 10^4 \to 10^6$ anos.

**Regras de Seleção:** $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, auto-estados de $\hat{\pi}$,

$$\hat{\pi}|\alpha\rangle = \lambda_\alpha|\alpha\rangle, \quad \hat{\pi}|\beta\rangle = \lambda_\beta|\beta\rangle.$$

Sejam $\hat{A}_{\rm even}$ e $\hat{A}_{\rm odd}$ operadores pares e ímpares por inversão espacial,

$$\hat{\pi}^\dagger \hat{A}_{\rm even}\hat{\pi} = \hat{A}_{\rm even} \quad \text{e} \quad \hat{\pi}^\dagger \hat{A}_{\rm odd}\hat{\pi} = -\hat{A}_{\rm odd},$$

então

i) $\langle\alpha|\hat{A}_{\text{even}}|\beta\rangle = \lambda_\alpha\lambda_\beta\langle\alpha|\hat{A}_{\text{even}}|\beta\rangle$

ii) $\langle\alpha|\hat{A}_{\text{odd}}|\beta\rangle = -\lambda_\alpha\lambda_\beta\langle\alpha|\hat{A}_{\text{odd}}|\beta\rangle$

ou

i) $\langle\alpha|\hat{A}_{\text{even}}|\beta\rangle \neq 0$ se $\lambda_\alpha\lambda_\beta = 1$

ii) $\langle\alpha|\hat{A}_{\text{odd}}|\beta\rangle \neq 0$ se $\lambda_\alpha\lambda_\beta = -1$

Conclusão: Transição para operadores pares não-nula entre estados de mesma paridade, para operadores ímpares paridades opostas.

**Não-conservação da paridade:** Interações fracas não conservam a paridade!