Aula 30 (5/Abr)

<u>Na aula de hoje:</u>

* Revisão da aula anterior.
* Simetrias em Mec. Quântica.
* Simetrias contínuas: translações espaciais, temporais e rotações.

—————— // ——————

<u>Revisão da última aula</u>

* Oscilador Harmônico Quântico 2D, usando quantões circulares.
* Simetrias em Mec. Clássica

—————— // ——————

<u>Capítulo 8: Simetrias em Mecânica Quântica</u>

<u>8.2 Mecânica Quântica e Simetrias</u>

Quando $\hat{H}$ é invariante por uma transformação simetria, teremos

$$\hat{R}^+ \hat{H} \hat{R} = \hat{H}$$

onde $\hat{R}$ é o operador associado a essa transformação.

↳ Veremos que $\hat{R}$ é operador unitário, i.e. $\hat{R}^+ = \hat{R}^{-1} \Leftrightarrow \hat{R}^+ \hat{R} = \hat{R}\hat{R}^+ = \mathbb{1}$, e então

$$\Rightarrow \hat{R}^+ \hat{H} \hat{R} = \hat{H} \Leftrightarrow \hat{H}\hat{R} = \hat{R}\hat{H} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{R}] = 0.$$

8.2.1) Simetrias Contínuas

Em M. Clássica vimos que podemos trabalhar em termos de transformações infinitesimais quando temos simetria contínua.

Vamos ver que transf. contínua infinitesimal pode ser escrita como

$$\hat{R}(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}$$

onde $\hat{R}(\varepsilon)$ é o operador associado à transformação infinitesimal, ε é o parâmetro infinitesimal (que é número real), enquanto que $\hat{G}$ é operador gerador da transformação sendo hermítico, $\hat{G}^{+} = \hat{G}$.

Poderemos então mostrar que se $\hat{H}$ é invariante por $\hat{R}(\varepsilon)$, teremos

$$\hat{R}(\varepsilon)^{+} \cdot \hat{H} \cdot \hat{R}(\varepsilon) = \hat{H}$$

$\hat{G}$ hermítico

$$\Leftrightarrow \left(\hat{\mathbb{1}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}^{+}\right)\hat{H}\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}\right) = \hat{H}$$

$$\Leftrightarrow \cancel{\hat{H}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\hat{G}\hat{H} - \hat{H}\hat{G}\right) + O(\varepsilon^2) = \cancel{\hat{H}}$$

$$\Leftrightarrow \left[\hat{G}, \hat{H}\right] = 0 \implies \frac{d}{dt}\langle\hat{G}\rangle = 0$$

Poderemos também encontrar base comum de auto-estados de $\hat{G}$ e $\hat{H}$ pois $\hat{G}$ e $\hat{H}$ comutam.

8.2.1.1) Translações Espaciais

Da M. Clássica sabemos como definir translação espacial infinitesimal. Então, como sabemos que valores esperados de sistema quântico se comportam classicamente, podemos escrever

$$\langle \hat{X} \rangle \longrightarrow \langle \hat{X} \rangle + \varepsilon = \langle \hat{X} \rangle_\varepsilon$$

$$\langle \hat{P} \rangle \longrightarrow \langle \hat{P} \rangle = \langle \hat{P} \rangle_\varepsilon$$

em analogia com M. Clássica. Em cima os valores esperados são dados por

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle$$

$$\langle \hat{P} \rangle = \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle$$

$$\langle X \rangle_\varepsilon = \langle \psi_\varepsilon | \hat{X} | \psi_\varepsilon \rangle$$

$$\langle \hat{P} \rangle_\varepsilon = \langle \psi_\varepsilon | \hat{P} | \psi_\varepsilon \rangle$$

sendo $|\psi_\varepsilon\rangle$ o estado transladado, i.e.

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \hat{T}(\varepsilon)|\psi\rangle$$

onde $\hat{T}(\varepsilon)$ é o operador translação infinitesimal.

<u>Nota</u>: Estamos aqui a adoptar a perspectiva activa, em que transladamos o estado. Poderíamos igualmente adoptar a perspectiva passiva em que transladamos o sistema de coordenadas. As conclusões a que chegaremos de seguida seriam as mesmas.

Como $\hat{T}(\varepsilon)$ actua em $|x\rangle$? Esperamos

$$\hat{T}(\varepsilon)|x\rangle \propto |x+\varepsilon\rangle$$
$$= e^{i\varepsilon \cdot g(x)/\hbar}|x+\varepsilon\rangle$$

que é forma mais geral. Notemos que se $\varepsilon \longrightarrow 0 \Longrightarrow \hat{T}(\varepsilon) \longrightarrow \hat{\mathbb{1}}$

Assim podemos escrever

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \hat{T}(\varepsilon)|\psi\rangle = \hat{T}(\varepsilon)\int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|\psi\rangle . dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\varepsilon g(x)/\hbar} |x+\varepsilon\rangle\langle x|\psi\rangle \, dx$$

$x' = x+\varepsilon$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\varepsilon g(x'-\varepsilon)/\hbar} |x'\rangle\langle x'-\varepsilon|\psi\rangle \, dx'$$

e assim temos que

$$\psi_\varepsilon(x) = \langle x|\psi_\varepsilon\rangle = e^{i\varepsilon g(x-\varepsilon)/\hbar} \langle x-\varepsilon|\psi\rangle$$

$$= e^{i\varepsilon g(x-\varepsilon)/\hbar} \cdot \psi(x-\varepsilon) .$$

Então temos que os valores esperados tomarão a forma

$$\langle\hat{X}\rangle_\varepsilon = \langle\psi_\varepsilon|\hat{X}|\psi_\varepsilon\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot |\psi(x-\varepsilon)|^2 \cdot dx$$

$x' = x-\varepsilon$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (x'+\varepsilon) \cdot |\psi(x')|^2 \cdot dx'$$

$$= \langle\hat{X}\rangle + \varepsilon$$

$$\langle\hat{P}\rangle_\varepsilon = \langle\psi_\varepsilon|\hat{P}|\psi_\varepsilon\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\varepsilon\cdots} \psi^*(x-\varepsilon) \cdot \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right] \cdot e^{i\varepsilon\cdots} \cdot \psi(x-\varepsilon)$$

$x' = x-\varepsilon$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\varepsilon g(x'+\varepsilon)/\hbar} \cdot \psi^*(x') \cdot \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right] e^{i\varepsilon g(x'+\varepsilon)/\hbar} \cdot \psi(x') \, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x')\,(-i\cancel{\hbar})\cdot\frac{i\varepsilon}{\cancel{\hbar}}\,\frac{\partial g}{\partial x'}\cdot\psi(x')\,dx' \; +$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x')\,dx'$$

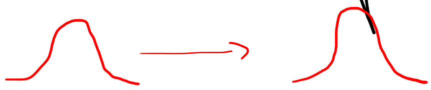
$$= \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle + \varepsilon\,\langle\psi|\,\frac{\partial g}{\partial x}\,|\psi\rangle$$

que se requerermos $\langle\hat{P}\rangle_\varepsilon = \langle\hat{P}\rangle$ então $g(x)$ terá que ser constante em x, e então podemos ignorar exponencial e escrever

$$\boxed{\hat{T}(\varepsilon)\,|x\rangle = |x+\varepsilon\rangle}$$

<u>Propriedades fundamentais do op. transl. infin.</u>

(i) A norma f.o. deve ser preservada na translação



$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi_\varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle = \langle\psi|\,\hat{T}(\varepsilon)^\dagger\cdot\hat{T}(\varepsilon)\,|\psi\rangle$$

o que implica que

$$\hat{T}(\varepsilon)^\dagger\,\hat{T}(\varepsilon) = \hat{1},$$

ou seja $\hat{T}(\varepsilon)$ deve ser unitário.

(ii) Uma trans. inf. ε, seguida de outra η, deve ser igual a uma única translação $\varepsilon+\eta$. Assim,

$$\hat{T}(\eta)\hat{T}(\varepsilon) = \hat{T}(\eta+\varepsilon)$$

(iii) A translação na direcção oposta, $-\varepsilon$, deve ser equivalente à inversa da translação ε,

$$\hat{T}(-\varepsilon) = \left[\hat{T}(\varepsilon)\right]^{-1}.$$

(iv) Se $\varepsilon \to 0$ teremos translação nula, ou seja, transformação identidade

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \hat{T}(\varepsilon) \longrightarrow \hat{1}.$$

Podemos então mostrar que se escrevermos $\hat{T}(\varepsilon)$ como

$$\boxed{\hat{T}(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\cdot\hat{G}}$$

onde $\hat{G}$ é hermitico e ε é real, obedeceremos automaticamente às quatro propriedades anteriores.

Demonstração

(i) $$\hat{T}^{+}(\varepsilon)\hat{T}(\varepsilon) = \Big(\hat{\mathbb{1}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\cdot\overbrace{\hat{G}^{+}}^{=\hat{G}}\Big)\Big(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}\Big)$$
$$= \hat{\mathbb{1}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\hat{G} - \hat{G}\right) + O(\varepsilon^2)$$
$$= \hat{\mathbb{1}} + O(\varepsilon^2)$$
$\square$

(ii) $$\hat{T}(\eta)\hat{T}(\varepsilon) = \Big(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\eta}{\hbar}\hat{G}\Big)\Big(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}\Big)$$
$$= \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar}(\eta+\varepsilon)\hat{G} + O(\varepsilon\eta)$$
$$= \hat{T}(\varepsilon+\eta)$$
$\square$

(iii) $$\hat{T}(-\varepsilon)\hat{T}(\varepsilon) = \hat{T}(0) = \hat{\mathbb{1}}$$ $\square$

$$\left[\ (iv)\ \lim_{\varepsilon \to 0} \hat{T}(\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \to 0}\left(\hat{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}\right) = \hat{1} \quad \square\right.$$

Mas qual deverá ser $\hat{G}$?

Usando o resultado anteriormente obtido

$$\langle x | \underbrace{\hat{T}(\varepsilon)}_{= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}} | \psi \rangle = \psi(x - \varepsilon)$$

e expandindo em potências de ε (até primeira ordem),

$$\Rightarrow \langle x | \hat{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G} | \psi \rangle = \psi(x) - \varepsilon \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_x$$

$$\Leftrightarrow \cancel{\psi(x)} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\langle x | \hat{G} | \psi \rangle = \cancel{\psi(x)} - \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\Leftrightarrow \langle x | \hat{G} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi$$

o que deixa claro que $\hat{G} = \hat{P}$, operador momento linear. Assim, teremos que

$$\boxed{\hat{T}(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{P}}$$

<u>Nota</u>: Isto é análogo ao que vimos em M. Clássica.

<u>Nota</u>: Tal como em M. Clássica, chamamos ao op. $\hat{P}$ o gerador das translações espaciais.

Podemos agora abordar quais as implicações de H ter simetria de translação.

simetria transl.

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi_\varepsilon|\hat{H}|\psi_\varepsilon\rangle$$

$$= \langle\psi|\hat{T}^+(\varepsilon)\,\hat{H}\,\hat{T}(\varepsilon)|\psi\rangle$$

o que implica que $\hat{H} = \hat{T}^+(\varepsilon)\,\hat{H}\,\hat{T}(\varepsilon)$. Mas teremos também que

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\hat{\mathbb{1}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{P}^{+}\right)\hat{H}\left(\mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{P}\right)|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\langle\psi|\left[\hat{P},\hat{H}\right]|\psi\rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

o que resulta em que

$$\langle\psi|\left[\hat{P},\hat{H}\right]|\psi\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt} = 0$$

T. Ehrenfest

Nota: Como $|\psi\rangle$ arbitrário teremos também que $[\hat{P},\hat{H}] = 0$.

Nota: Teremos base do espaço de estados, comum a $\hat{P}$ e $\hat{H}$.

Nota: Poderemos escrever $\hat{H} = \hat{T}^{+}(\varepsilon)\,\hat{H}\,\hat{T}(\varepsilon)$.

Podemos estender estes resultados para transformações finitas, $\hat{T}(a)$?

↳ Vimos atrás (propriedade (ii)) que translações sucessivas são equivalentes a uma só translação soma de todas essas translações. Assim fazendo $\underline{N}$ translações sucessivas de tamanho $\frac{a}{N}$ teremos no final translação $\underline{a}$,

$$\hat{T}(a) = \lim_{N\to\infty} \hat{T}(a/N) \cdot \hat{T}(a/N) \cdots \hat{T}(a/N)$$

$$= \lim_{N\to\infty} \left[\hat{T}(a/N)\right]^N$$

$$\lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{ax}{N}\right)^N = e^{-ax} \qquad = \lim_{N\to\infty}\left[\hat{1} - \frac{ia}{\hbar N}\hat{P}\right]^N$$

$$\Longrightarrow \boxed{\hat{T}(a) = e^{-ia\hat{P}/\hbar}} \longrightarrow \hat{T}(\vec{r}) = e^{-\frac{i\vec{r}\cdot\vec{\hat{P}}}{\hbar}}$$

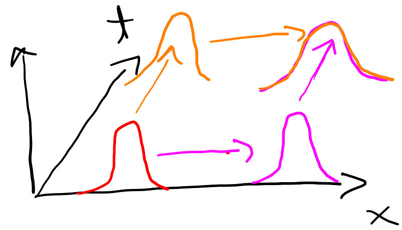
$$= \left(\hat{1} - \frac{ia}{\hbar}\hat{P} - \frac{a^2}{\hbar^2}\hat{P}^2 + \dots\right)$$

Nota: É trivial mostrar que

$$\hat{T}(a)\hat{T}(b) = \hat{T}(a+b)$$

pois argumentos da exponencial comutam.

Nota: Se $[\hat{T}(a), \hat{H}] = 0$, então $\hat{T}(a)$ comuta com evolução temporal, e podemos então translador o sistema antes ou depois da evolução temporal que obtemos o mesmo resultado



8.2.1.2) Translações temporais

A evolução temporal pode ser vista como translação no tempo.

Se em $t=t_0$ temos o sistema no estado $|\alpha\rangle$ e o evoluimos até $t=t_1$, onde teremos outro estado $|\beta\rangle$, então podemos relacionar $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$

$$|\beta(t_1)\rangle = \hat{U}(t_1,t_0)\,|\alpha(t_0)\rangle$$

$$\Longleftrightarrow \sum_n b_n|\varphi_n\rangle = \hat{U}(t_1,t_0)\Big[\sum_n a_n|\varphi_n\rangle\Big]$$

onde em geral temos $b_n \neq a_n$ e $|b_n| \neq |a_n|$. Chamamos a $\hat{U}(t_1,t_0)$, operador de evolução temporal.

$t_1 > t_0$

Algumas propriedade de $U(t_1,t_0)$?

(i) A norma p. o. é preservada

$$\langle\beta(t_1)|\beta(t_1)\rangle = \langle\alpha(t_0)|[\hat{U}(t_1,t_0)]^{\dagger}U(t_1,t_0)|\alpha(t_0)\rangle$$

e como $\langle \alpha(t_0) | \alpha(t_0) \rangle = 1$, teremos

$$\left[\hat{U}(t_1, t_0)\right]^{+} U(t_1, t_0) = \hat{\mathbb{1}}$$

ou seja o operador evolução temporal é unitário.

(ii) A evolução t_0 a t_2 pode ser escrita como evol sucessiva entre t_0 e t_1 seguida de t_1 a t_2

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\, \hat{U}(t_1, t_0)$$

onde $t_2 > t_1 > t_0$.

(iii) Para evolução temporal infinitesimal, δ, se tomamos $\delta \to 0$ teremos

$$\lim_{\delta \to 0} U(t_0 + \delta, t_0) \longrightarrow \hat{\mathbb{1}}$$

Nota: Estas propriedades são muito semelhantes às propriedades das translações espaciais. Apenas omitimos a propriedade evolução temporal inversa, pois na natureza não nos é possível evoluir para trás no tempo. [Temos, no entanto, alguns sistemas quânticos que têm simetria de inversão temporal, i.e. $t \to -t$; mas não vamos abordar essa simetria aqui.]

De forma semelhante às translações espaciais se escrevermos

$$\boxed{\hat{U}(t_0+\delta, t_0) = \hat{\mathbb{1}} - i\delta\hat{\Omega}}$$

onde $\hat{\Omega}$ é hermítico e δ é real, satisfaremos automaticamente as propriedades anteriores.