# Aula 32 (10/Abr)

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

* Revisão da aula anterior.
* Simetrias discretas.
  - Paridade.
  - Translações discretas.

—————— // ——————

<u>Revisão da última aula</u>

* Simetria translação temporal.
* Simetria rotação.

—————— // ——————

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

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

### 8.2.2) <u>Simetrias discretas</u>

Até agora consideramos apenas simetrias contínuas. Mas nem todas as simetrias relevantes em M.Q. são contínuas. Existem vários exemplos relevantes de simetrias discretas: paridade, translações discretas, rotações discretas, inversão temporal.

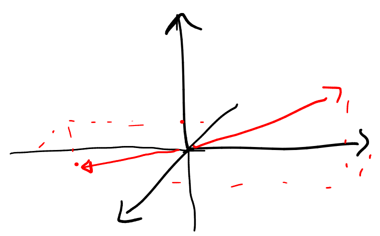
De seguida vamos olhar em detalhe os dois primeiros casos.

## 8.2.2.1) Paridade

Também chamada de inversão espacial, e classicamente leva

$$\vec{r} \longrightarrow -\vec{r} = (-x, -y, -z)$$

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}} \longrightarrow -m\dot{\vec{r}} = -\vec{p}$$



Usando os valores esperados que se devem comportar classicamente, requeremos

$$\langle \hat{X} \rangle \longrightarrow \langle \hat{X} \rangle_\pi = -\langle \hat{X} \rangle$$

$$\langle \hat{P} \rangle \longrightarrow \langle \hat{P} \rangle_\pi = -\langle \hat{P} \rangle$$

onde $\langle \hat{X} \rangle_\pi \equiv \langle \psi_\pi | \hat{X} | \psi_\pi \rangle$ e $\langle \hat{P} \rangle_\pi = \langle \psi_\pi | \hat{P} | \psi_\pi \rangle$,

tal que

$$|\psi_\pi\rangle = \hat{\Pi}\, |\psi\rangle ,$$

onde $\hat{\Pi}$ é o operador inversão espacial (ou paridade).

Como vai actuar no ket $|x\rangle$?

↳ Esperamos que partícula em $x$ seja mudada para $-x$. A forma mais geral será

$$\hat{\Pi}\, |x\rangle = e^{i\delta(x)}\, |-x\rangle .$$

Poderemos mostrar que

$$\langle \hat{X} \rangle_\pi = \langle \psi_\pi | \hat{X} | \psi_\pi \rangle = \iint_{-\infty}^{-\infty} dx\, dx' \, \overbrace{\langle \psi | x \rangle}^{\psi^*(x)} \overbrace{\langle x | \hat{N}^\dagger}^{\langle -x | e^{-ig(x)}} . \hat{X} . \overbrace{\hat{N} . | x' \rangle}^{e^{ig(x')} | -x' \rangle} \overbrace{\langle x' | \psi \rangle}^{\psi(x')}$$

$$= \iint dx\, dx' \, \psi^*(x) \underbrace{\langle -x | \hat{X} | -x' \rangle}_{= -x . \delta(x'-x)} \psi(x') . e^{i[g(x') - g(x)]}$$

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \psi^*(x) . x . \psi(x) = - \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle$$

$$= - \langle \hat{X} \rangle$$

Para o operador momento procedemos da mesma forma

$$\langle \hat{P} \rangle_\pi = \langle \psi_\pi | \hat{P} | \psi_\pi \rangle = \langle \psi | \hat{N}^\dagger \hat{P} \hat{N} | \psi \rangle$$

$$= \dots$$

$$= - \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle - \hbar \langle \psi | \frac{\partial g}{\partial x} | \psi \rangle$$

que se requerermos $\langle \hat{P} \rangle_\pi = - \langle \hat{P} \rangle$

então $g(x)$ = constante e podemos ignorar a fase.

Teremos então

$$\hat{\pi}|x\rangle = |-x\rangle \; ,$$

$$\hat{\pi}|p\rangle = |-p\rangle \; .$$

É claro que

$$\psi_\pi(x) = \langle x|\psi_\pi\rangle = \langle x|\hat{\pi}|\psi\rangle$$

$$= \langle -x|\psi\rangle = \psi(-x)$$

$$\Longleftrightarrow \psi_\pi(x) = \psi(-x)$$

Note: No espaço dos momentos é análogo, $\psi_\pi(p) = \psi(-p)$.

Se actuarmos duas vezes com $\hat{N}$ em $|x\rangle$ teremos

$$\hat{N}^2 |x\rangle = \hat{N} |-x\rangle = |-(-x)\rangle = |x\rangle$$

que sendo válido para todos os $|x\rangle$ desta representação, pode ser escrito

$$\hat{N}^2 = \hat{\mathbb{1}}$$

de onde podemos elencar algumas propriedades de $\hat{N}$:

(i) $\hat{N}^{-1} = \hat{N}$ pois $\hat{N}^2 = \hat{N}\hat{N} = \hat{\mathbb{1}}$.

(ii) Os seus auto-vals serão $\pm 1$ pois $\hat{N}^2$ tem auto-val $+1$, logo $\hat{N}$ terá auto-val $\pm\sqrt{+1} = \pm 1$.

(iii) $\hat{N}$ é hermítico e unitário, pois
$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \Leftrightarrow \langle \psi | \hat{N}^+ \hat{N} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$
$\Rightarrow \hat{N}^+ \hat{\Pi} = \hat{\mathbb{1}} \Rightarrow \hat{N}^+ = \hat{N} = \hat{N}^{-1}$.

<u>Nota:</u> Se $|\alpha\rangle$ é auto-estado de $\hat{\Pi}$, sabemos que

$$\hat{\Pi}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$$

onde $a = \pm 1$. Mas sabemos tb que

$$\langle x|\hat{\Pi}|\alpha\rangle = \langle -x|\alpha\rangle = \varphi_a(-x)$$

$$\parallel$$

$$a\langle x|\alpha\rangle = a\,\varphi_a(x)$$

ou seja, auto estados de $\hat{\Pi}$ na representação $\{|x\rangle\}$ têm paridade bem definida, i.e

$$\varphi_a(-x) = a\,\varphi_a(x) \Rightarrow \begin{cases} \text{função par se } a=+,\ \varphi_+(-x)=\varphi_+(x) \\ \text{função impar se } a=-,\ \varphi_-(-x)=-\varphi_-(x) \end{cases}$$

<u>Nota:</u> Como $\langle\hat{X}\rangle_{\Pi} = -\langle\hat{X}\rangle \Leftrightarrow \langle\psi|\hat{\Pi}^{+}\hat{X}\hat{\Pi}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle$ e então

$$\hat{\Pi}^{+}\hat{X}\hat{\Pi} = -\hat{X}$$

$$\Longleftrightarrow \hat{X}\hat{\Pi} = -\hat{\Pi}\hat{X}$$

$$\Longleftrightarrow \hat{X}\hat{\Pi} + \hat{\Pi}\hat{X} = 0$$

$$\Longleftrightarrow \{\hat{X}, \Pi\} = 0$$

ou seja, $\hat{\Pi}$ e $\hat{X}$ anti-comutam.
Acontece o mesmo com $\hat{\Pi}$ e $\hat{P}$.

<u>Note</u>: Os vectores de operadores $\hat{\vec{X}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ e $\hat{\vec{P}} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z)$ também anti-comutam com $\hat{\Pi}$, i.e.

$$\{\hat{\Pi}, \hat{\vec{X}}\} = 0 \Rightarrow \hat{\Pi}^+ \hat{\vec{X}} \hat{\Pi} = -\hat{\vec{X}}$$

$$\{\hat{\Pi}, \hat{\vec{P}}\} = 0 \Rightarrow \hat{\Pi}^+ \hat{\vec{P}} \hat{\Pi} = -\hat{\vec{P}}$$

como esperado para vectores clássicos. Mas isto não acontece com $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}$

$$\hat{\Pi}^+ \hat{\vec{L}} \hat{\Pi} = \hat{\vec{L}} \Rightarrow [\hat{\Pi}, \hat{\vec{L}}] = 0 \quad ,$$

que tb é válido para qualquer outro momento angular.

↳ Vectores que se transformam assim (apesar de se transformarem normalmente sob rotações) são chamados <u>pseudo-vectores</u>.

Quais as implicações de $\hat{H}$ invariante por inversão espacial?

↳ Rapidamente concluimos

$$\hat{\Pi}^{+}\hat{H}\hat{\Pi} = \hat{H} \Longleftrightarrow [\hat{H},\hat{\Pi}] = 0$$

logo há base do espaço de estados composta por auto-estados comuns a $\hat{H}$ e a $\hat{\Pi}$.

↳ No entanto em geral auto-estados de $\hat{H}$ não precisam ter paridade bem definida.

Teorema: Se $|\phi_n\rangle$ é auto-estado não degenerado de $\hat{H}$ e se $[\hat{H},\hat{\Pi}]=0$ então $|\phi_n\rangle$ é auto-estado de $\hat{\Pi}$, logo tem paridade bem definida.

Demonstração: Notemos que $\frac{\hat{1}\pm\hat{\Pi}}{2}|\phi_n\rangle$ é auto-estado de $\hat{\Pi}$ pois

$$\hat{\Pi}\,\frac{\hat{1}\pm\hat{\Pi}}{2}|\phi_n\rangle = \pm\,\frac{\pm\hat{\Pi}+\hat{1}}{2}|\phi_n\rangle$$

Mas $|\phi_n\rangle$ e $\frac{\hat{1}\pm\hat{\Pi}}{2}|\phi_n\rangle$ têm que ser o mesmo estado pois este é auto-estado não-degenerado de $\hat{H}$, $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$. $\square$

Nota: Se $|\phi_n\rangle$ degenerado isto já não é obrigatório. Mas podemos sempre base em que os $|\phi_n\rangle$ tenham paridade bem definida.

Nota: Suponhamos $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são auto-estados de $\hat{\Pi}$

$$\hat{\Pi}|\alpha\rangle = \xi_\alpha|\alpha\rangle \, ,$$

$$\hat{\Pi}|\beta\rangle = \xi_\beta|\beta\rangle \, ,$$

onde $\xi_{\alpha,\beta} = \pm 1$. Podemos mostrar que

$$\langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle = 0$$

se $\xi_\alpha = \xi_\beta$ sendo $\neq 0$ se $\xi_\alpha = -\xi_\beta$. Ou seja, operador $\hat{x}$ (op. ímpar) "liga" auto-estados de diferentes paridades.

$\downarrow$

$$\langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\beta|\hat{\Pi}^\dagger}_{\langle\beta|\xi_\beta}\underbrace{\hat{\Pi}\hat{x}\hat{\Pi}^\dagger}_{=-\hat{x}}\underbrace{\hat{\Pi}|\alpha\rangle}_{\xi_\alpha|\alpha\rangle}$$

$$= -\xi_\beta \cdot \xi_\alpha \langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle =$$

$$\Rightarrow \text{se } \xi_\alpha = \xi_\beta \Rightarrow \langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle = -\langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle = 0 \quad \square$$

Nota: Se $\hat{H}$ é inv. por $\hat{\Pi}$, auto-estados não degenerados não podem ter dipolo eléctrico, i.e.,

$$\langle \phi_n | \hat{x} | \phi_n \rangle = 0 .$$

Regra de selecção.

Nota: Há leis não invariantes por inversão espacial

↳ Interacção fraca.

↳ Cristal sem inv. espacial.

8.2.2.2) Simetria de Translação Discreta

É muito relevante em sólidos cristalinos

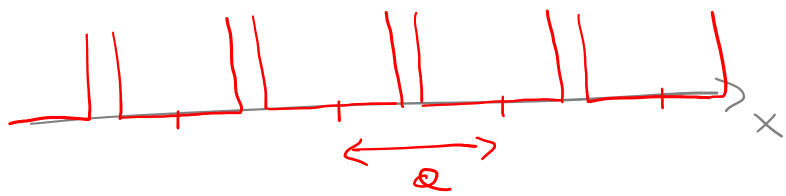
Apenas subconjunto de translações serão simetria do sistema físico.

Vamos trabalhar em 1D. Se o sist. tem simetria translação discreta por múltiplos de $a$, i.e.

$$\hat{T}^{+}(R)\,\hat{H}\,\hat{T}(R) = \hat{H},$$

onde $R \in \{0, \pm a, \pm 2a, \pm 3a, \dots\}$.

Nota: Pensemos num $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, onde $\hat{V}$ tem periodicidade $a$, $V(x+a) = V(x)$.




Se $\hat{T}^{+}(\hat{R})\,\hat{H}\,\hat{T}(\hat{R}) = \hat{H}$ e como sabemos que $\hat{T}^{+}\hat{T} = \hat{1}$ então

$$[\hat{H}, \hat{T}(R)] = 0$$

para $R \in \{0, \pm a, \pm 2a, \dots\}$.

Podemos então encontrar base do espaço de estados composta por auto-estados comuns a $\hat{H}$ e a todos os $\hat{T}(R)$, onde $R \in \{0, \pm a, \dots\}$.

Mas qual seria essa base?

Imaginemos potencial periódico 1D (tal como num cristal),


e $V(x + a.n) = V(x)$ onde $n \in \mathbb{N}_0$.

Consideremos estado centrado num poço, $|\varphi_n\rangle$

Como sist. periódico em $x$, estes $|\varphi_n\rangle$ devem ser iguais (só que centrados em poços diferentes)

Actuando com $\hat{T}(a)$ em $|\varphi_n\rangle$

$$\hat{T}(a)|\varphi_n\rangle = |\varphi_{n+1}\rangle$$

Claramente vemos que $|\varphi_n\rangle$ não são auto-estados $\hat{T}(a)$.

Se combinarmos linearmente todos os $|\varphi_n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n . |\varphi_n\rangle$$

então

$$\hat{T}(a)|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$\overset{n+1=m}{=} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_{m-1} |\varphi_m\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

que será auto-estado de $\hat{T}(a)$ se $c_{n-1} = \lambda c_n$ para todo o $n \in \mathbb{Z}_0$.

Este tipo de relação terá que se verificar para todas translações discretas que são simetrias de $\hat{H}$, $\hat{T}(a.\nu)$ on $\nu \in \mathbb{Z}_0$,

$$c_{n-\nu} = \lambda_\nu c_n \quad , \quad \forall n,\nu \in \mathbb{Z}_0 .$$

Como $\hat{T}$ é unitário mas não hermítico (auto-vals serão números complexos), então teremos

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad , \text{ onde } \hat{T}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \langle\psi|\hat{T}^{+}\hat{T}|\psi\rangle = 1$$

$$\Leftrightarrow \langle\psi|\lambda^{*}.\lambda|\psi\rangle = 1$$

$$\Leftrightarrow |\lambda|^{2} = 1 \Longrightarrow \lambda = e^{i\theta}$$

$$c_{n-1} = \lambda c_n \Rightarrow c_{n-1} = e^{-i\theta} \cdot e^{i\theta n} = e^{i\theta(n-1)}$$

Fica então claro que os $c_n = e^{i\theta n}$, e assim os auto-estados de $\hat{T}(a.\nu)$ terão forma

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\theta n}|\varphi_n\rangle}$$

tal que

$$\hat{T}(a.\nu)|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\theta n}|\varphi_{n+\nu}\rangle$$

$$\overset{m=n+\nu}{=} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{i\theta(m-\nu)}|\varphi_m\rangle$$

$$= e^{-i\theta\nu}|\psi\rangle$$

<u>Nota</u>: Podemos etiquetar estes auto-estados com $\theta$, i.e. $|\psi_\theta\rangle$.

Para vermos qual a forma destes auto-estados na repres. posições $\{|x\rangle\}$ façamos

$$\langle x|\hat{T}(a)|\psi_\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x|\psi_\theta\rangle = e^{-i\theta}\psi_\theta(x)$$

$$\Leftrightarrow \langle x-a|\psi_\theta\rangle = \psi_\theta(x-a)$$

o que implica que

→ funções de Bloch

$$\boxed{\psi_\theta(x) = e^{i\theta x/a}\cdot u(x)}$$

onde $u(x)$ tem periodicidade da rede cristalina, i.e. $u(x+a\cdot\nu) = u(x)$.

↳ <u>Teorema de Bloch</u>

Por analogia com o que vimos para ondas planas e como $\hat{P}$ é gerador das translações ($\vec{p} = \vec{k}\hbar$) escolhemos $\theta = k\cdot a$ e assim teremos que os auto-estados de $\hat{T}(a.\mathbb{1})$

$$\boxed{|\psi_k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikan} |\varphi_n\rangle}$$

sendo que as funções de Bloch ficam

$$\boxed{\psi_k(x) = e^{ikx} u(x)}$$

<u>Nota</u>: Os valores de $k$ são contínuos.
Teremos infinitos auto-estados $|\psi_k\rangle$
de $\hat{T}(a.\mathbb{1})$.

<u>Nota</u>: Há periodicidade $\frac{2\pi}{a}$ nos auto-estados $|\psi_k\rangle$

$$|\psi_{k+2\pi/a}\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(kan+2\pi n)} |\varphi_n\rangle$$

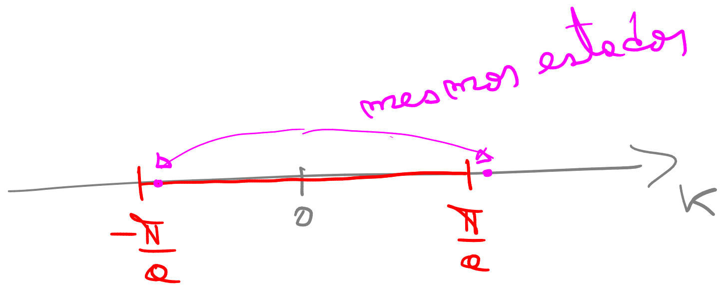
$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikan} |\varphi_n\rangle$$

$$= |\psi_k\rangle$$

e assim bastar-nos-à olhar

para um intervalo de valores de $k$ de comprimento $2\pi/a$.

**Nota:** Tipicamente escolhemos $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ ao qual chamamos Primeira Zona de Brillouin.




**Nota:** A definição de $|\psi_k\rangle$ é série de Fourier logo a relação de fecho é

$$\frac{a}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\, dk = \mathbb{1} \quad ,$$

que podemos verificar

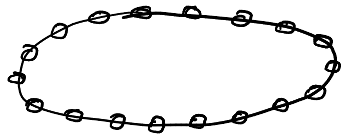
$$|\psi_q\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{iqan}\,|\varphi_n\rangle$$

$$\Leftrightarrow |\psi_q\rangle = \frac{a}{2\pi}\sum \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{iqan}\,\underbrace{\langle\psi_k|\varphi_n\rangle}_{=e^{-ikan}}\,|\psi_k\rangle\, dk$$

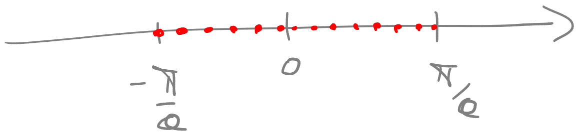
$$\Leftrightarrow |\psi_q\rangle = \frac{a}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \overbrace{\sum_n e^{i(q-k)an}}^{\frac{2\pi}{a}\delta(q-k)}\,|\psi_k\rangle\, dk = |\psi_q\rangle \; \square$$

<u>Nota:</u> Sólidos periódicos $|\varphi_{N+n}\rangle = |\varphi_n\rangle$ ,

$\Rightarrow K_\nu = \frac{2\pi}{a.N}.\nu$ , onde



$\nu = -\frac{\pi}{a}, \dots, 0, \dots, \frac{\pi}{a}$

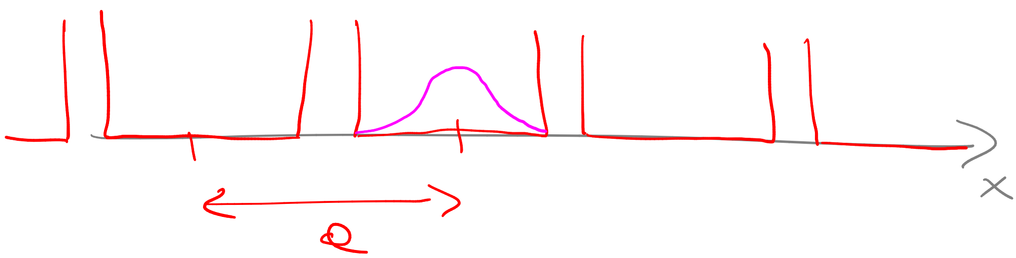




Mas se $N \to \infty$ então $K_{\nu+1} - K_\nu = \Delta K = \frac{2\pi}{Na}$ ,
$\Delta K \to 0$ e podemos escrever os somatórios em $\sum_{K_\nu} \longrightarrow \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK$

<u>Nota:</u> Em 2D e 3D é essencialmente análogo.

<u>Exemplo:</u> Sequência de poços de potencial infinitos espaçados de $\underline{a}$ , i.e $V(x+a) = V(x)$



O Hamiltoniano será

$$\hat{H} = \sum_n \hat{H}_n$$

onde $H_n$ é o Hamiltoniano do poço potencial infinito centrado em $a.n$, $\hat{H}_n|\varphi_n^0\rangle = E_0|\varphi_n^0\rangle$.

↳ Consideremos apenas estado fundamental de cada poço, então base $\{|\varphi_n^0\rangle\}$ e o $\hat{H}$

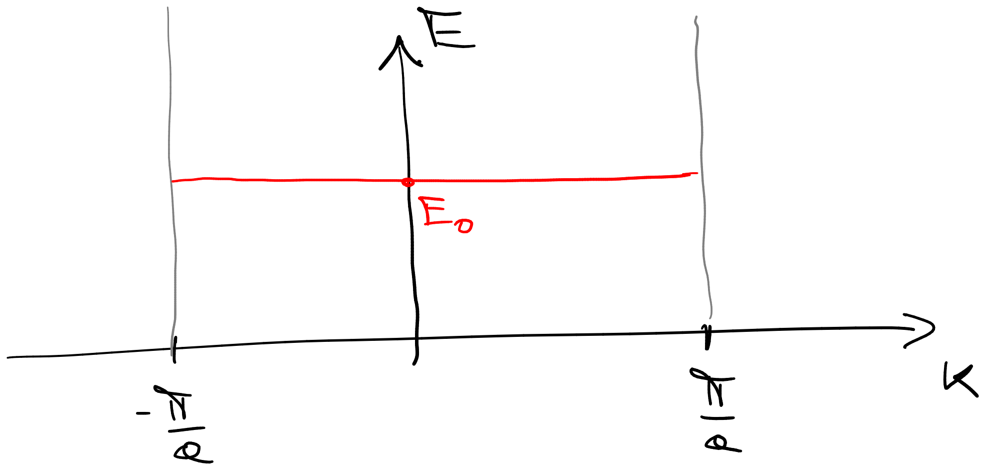
$$\hat{H} = \sum_n E_0 |\varphi_n^0\rangle\langle\varphi_n^0|$$

Então na base $\{|\psi_k\rangle\}$ teremos

$$\hat{H}\overbrace{|\psi_k\rangle}^{=\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikan}|\varphi_n^0\rangle} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikan} E_0 |\varphi_n^0\rangle$$

$$= E_0|\psi_k\rangle$$

Podemos representar estes auto-valores em termos do número quântico $\underline{k}$ que distingue os nossos auto-estados de $H$ e $\hat{T}$,




**Exemplo:** Se agora tivermos poço potencial finito


Como agora $|\varphi_n^0\rangle$ se estendem até aos poços vizinhos podemos reescrever $\hat{H}$ como

$$\hat{H} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Big[ E_0 |\varphi_n^0\rangle\langle\varphi_n^0| + \gamma |\varphi_n^0\rangle\langle\varphi_{n+1}^0| + \gamma |\varphi_{n+1}^0\rangle\langle\varphi_n^0| \Big]$$

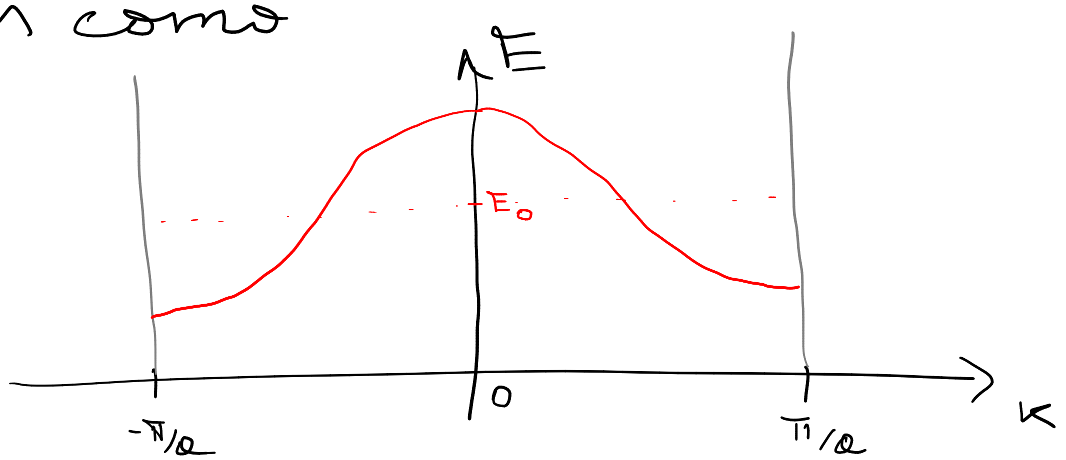
e assim teremos para os auto-estados $|\psi_k\rangle$ de $\hat{H}$ e $\hat{T}(a\cdot\nu)$

$$\hat{H}\overbrace{|\psi_k\rangle}^{=\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikan}|\varphi_n^0\rangle} = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty}\Big[E_0|\varphi_m^0\rangle\underbrace{\langle\varphi_m^0|\varphi_n^0\rangle}_{=\delta_{m,n}}\cdot e^{ikam} + \gamma|\varphi_m^0\rangle\overbrace{\langle\varphi_{m+1}^0|\varphi_n^0\rangle}^{=\delta_{m+1,n}} e^{ikan} + \gamma|\varphi_{m+1}^0\rangle\cdot\underbrace{\langle\varphi_m^0|\varphi_n^0\rangle}_{\delta_{m,n}} e^{ikan}\Big]$$

$$= \sum_n\left[E_0 + \gamma\left(e^{ika} + e^{-ika}\right)\right]\cdot|\varphi_n^0\rangle\cdot e^{ikan}$$

$$= \left[E_0 + 2\gamma\cos(ka)\right]|\psi_k\rangle$$

e os auto-vals podem ser representados como



Nota: Chamaremos a este representa-
ção dos níveis de energia, ban-
das de energia.