Aula 31 (6/Abr)

Na aula de hoje:

* Revisão da aula anterior.
* Simetria translação temporal.
* Simetria rotação.
* Simetrias discretas.

Revisão da última aula

* Simetrias em Mec. Quântica.
* Simetrias contínuas: translações espaciais, temporais.

Capítulo 8: Simetrias em Mecânica Quântica

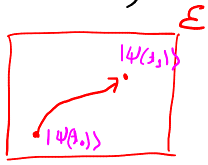
8.2 Mecânica Quântica e Simetrias

8.2.1) Simetrias contínuas

8.2.1.2) Translações temporais (cont.)

Operador translação temporal, $\hat{U}(t_1,t_0)$,

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



onde $t_1 > t_0$, tem seguintes propriedades:

(i) Preservação da norma da f. o. implica que operador evolução temporal é unitário

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

(ii) Evolução entre t_0 e t_2 pode ser escrita

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

onde $t_2 > t_1 > t_0$.

(iii) Evolução infinitesimal obedecerá a

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

Se escrevermos

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

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

Demonstração:

(i) $$\left[\hat{U}(t_0+\delta, t_0)\right]^{\dagger} \cdot \hat{U}(t_0+\delta, t_0) = \Big[\hat{1} + i\delta.\overbrace{\hat{\Omega}^{\dagger}}^{\overset{\hat{\Omega}}{/\!/}}\Big]\left[\hat{1} - i\delta\hat{\Omega}\right]$$

$$= \hat{1} - i\delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}) + \mathcal{O}(\delta^2)$$

$$= \hat{1} + \mathcal{O}(\delta^2)$$

∎

(ii) $$\hat{U}(t_0+\delta+\eta, t_0+\delta).\hat{U}(t_0+\delta, t_0)$$

$$= \left[\hat{1} - i\eta.\hat{\Omega}\right]\left[\hat{1} - i\delta\hat{\Omega}\right]$$

$$= \hat{1} - i(\eta+\delta).\hat{\Omega} + \mathcal{O}(\eta.\delta)$$

$$= \hat{U}(t_0+\eta+\delta, t_0)$$

∎

(iii) $\displaystyle\lim_{\delta\to 0} U(t_0+\delta, t_0) = \lim_{\delta\to 0}\left[\hat{\mathbb{1}} - i\delta\hat{\Omega}\right] = \hat{\mathbb{1}}$ $\square$

Mas qual deverá ser o operador $\hat{\Omega}$?

$$|\psi(t_0+\delta)\rangle = \underbrace{\hat{U}(t_0+\delta, t_0)}_{= \hat{\mathbb{1}} - i\delta\hat{\Omega} + \mathcal{O}(\delta^2)}|\psi(t_0)\rangle$$

que podemos expandir em δ até ordem 2,

$$\Rightarrow \cancel{|\psi(t_0)\rangle} + \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\Big|_{t=t_0}\delta + \mathcal{O}(\delta^2) = \left[\cancel{\hat{\mathbb{1}}} - i\delta\hat{\Omega} + \mathcal{O}(\delta^2)\right]|\psi(t_0)\rangle$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\Big|_{t=t_0}}_{\parallel \ \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t_0)|\psi(t_0)\rangle} = -i\hat{\Omega}|\psi(t_0)\rangle$$

$$\Leftrightarrow \cancel{-}\frac{\cancel{i}}{\hbar}\hat{H}(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \cancel{-}\cancel{i}\,\hat{\Omega}|\psi(t_0)\rangle$$

$$\Leftrightarrow \hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$$

ou seja, tem gerador $\hat{\Omega} = \hat{H}$,

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

Tal como para translações espaciais, podemos escrever operador translação temporal finito,

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

Podemos dividir $\Delta t = t_1 - t_0$ em $\Delta t / N$ com $N \longrightarrow \infty$, obtendo

$$\hat{U}(t_1, t_0) = \lim_{N \to \infty} \hat{U}\left(t_0 + \Delta t, t_0 + \frac{N-1}{N} \Delta t\right) \cdots \hat{U}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{N}, t_0\right)$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left[\hat{\mathbb{1}} - \frac{i \Delta t}{\hbar N} \cdot \hat{H} \right]^N$$

$$\Longleftrightarrow \boxed{\hat{U}(t_1, t_0) = e^{-i \Delta t \cdot \hat{H} / \hbar}}$$

que na base auto-estados de $\hat{H}$ $\{|\phi_n\rangle\}$, $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$, terá forma

$$\hat{U}(t_1, t_0) |\phi_n\rangle = e^{-i \Delta t E_n / \hbar} |\phi_n\rangle.$$

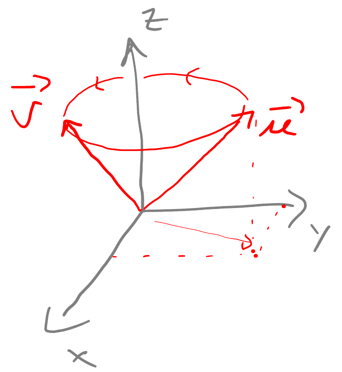
Nota: Se $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, tomar $\langle \hat{A} \rangle$ antes ou depois evoluir vai ser o mesmo $\Rightarrow$ constante do movimento.

Nota: Em M Clássica semelhante, H é gerador transl. temporais infinitesimais.

8.2.1.3) Rotações

No espaço 3D rodar um vector pode ser escrito em linguagem matricial como

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}$$



onde R é matriz ortogonal, $R^T R = R R^T = \mathbb{1}$.

Por exemplo, rotação de ângulo ϕ em torno de Oz é dada pela matriz

$$R_z(\phi) = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi & 0 \\ \operatorname{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

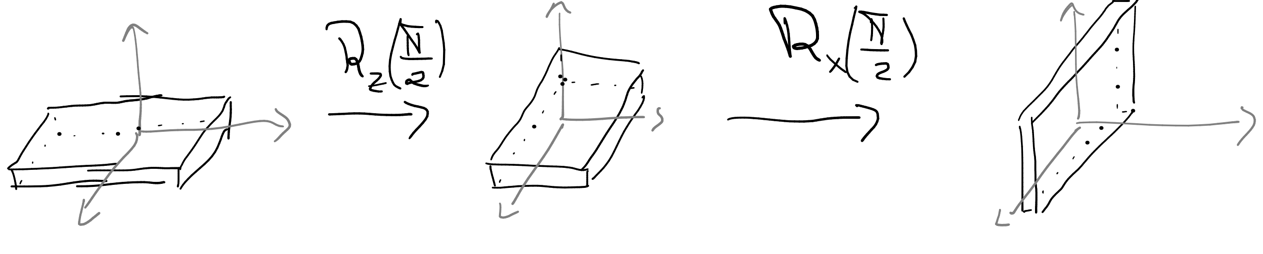
que mantém u_3 constante, misturando u_1 e u_2

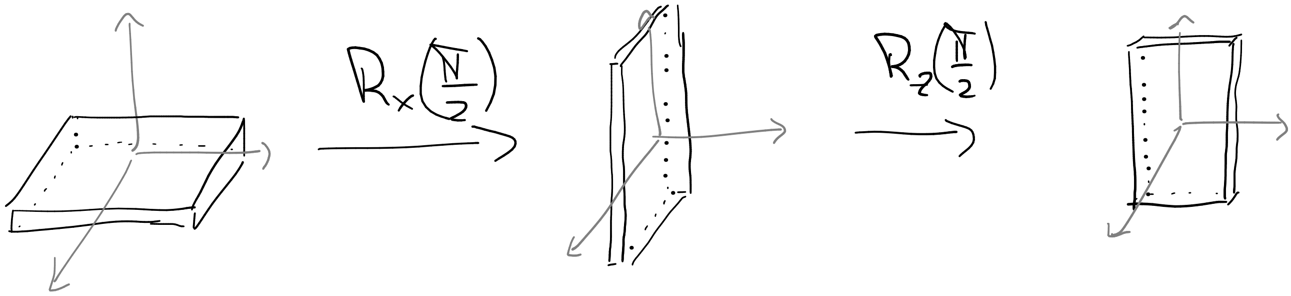
$$\begin{cases} v_1 = \cos\phi\, u_1 - \operatorname{sen}\phi\, u_2 \\ v_2 = \operatorname{sen}\phi\, u_1 + \cos\phi\, u_2 \\ v_3 = u_3 \end{cases}$$

As matrizes $R_x(\phi)$ e $R_y(\phi)$ são

$$R_x(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi \\ 0 & \operatorname{sen}\phi & \cos\phi \end{bmatrix}, \quad R_y(\phi) = \begin{bmatrix} \cos\phi & 0 & \operatorname{sen}\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\operatorname{sen}\phi & 0 & \cos\phi \end{bmatrix}$$

Devemos notar que $R_x(\phi)$, $R_y(\phi)$ e $R_z(\phi)$ não comutam.





<u>Nota:</u> No entanto rotações em torno do mesmo eixo comutam.

[<u>Exercício:</u> Verificar estas duas propriedades usando $R_x(\phi)$, $R_y(\phi)$ e $R_z(\phi)$

Para <u>rotações infinitesimais</u> $\phi = 0 + \varepsilon$, podemos reescrever $R_x(\varepsilon)$, $R_y(\varepsilon)$, $R_z(\varepsilon)$ (mantendo termos até 2ª ordem em ε) como

$$R_z(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$$

$$R_x(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 \end{bmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$$

$$R_y(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1-\varepsilon^2/2 \end{bmatrix} + O(\varepsilon^3)$$

que podemos mostrar que comutam se mantivermos apenas termos de ordem 0 e 1. Por exemplo,

$$R_x(\varepsilon).R_y(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & \underline{\underline{0}} & \varepsilon \\ \underline{\underline{\varepsilon^2}} & 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2 \end{bmatrix} + O(\varepsilon^3)$$

$$R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{bmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & \underline{\underline{\varepsilon^2}} & \varepsilon \\ \underline{\underline{0}} & 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2 \end{bmatrix} + O(\varepsilon^3)$$

que são iguais se descartarmos termos $O(\varepsilon^2)$., ou seja rotações muito pequenas.

Nota: Tomar $\varepsilon \to 0$ em $R_x(\varepsilon)$, $R_y(\varepsilon)$ e $R_z(\varepsilon)$ dá a matriz identidade, como esperado.

Com estas infos vamos agora construir operadores de rotação infinitesimais.

Esperamos que valores esperados de $\hat{X}$ e $\hat{P}$ se comportem classicamente. Assim, para rotação infinitesimal em torno de Oz esperamos ter

$$\langle \hat{X} \rangle_R = \langle \hat{X} \rangle \cos\phi - \langle \hat{Y} \rangle \operatorname{sen}\phi ,$$

$$\langle \hat{Y} \rangle_R = \langle \hat{X} \rangle \operatorname{sen}\phi + \langle \hat{Y} \rangle \cos\phi ,$$

$$\langle \hat{Z} \rangle_R = \langle \hat{Z} \rangle ,$$

onde $\langle \hat{X} \rangle_R = \langle \psi_R | \hat{X} | \psi_R \rangle$, enquanto que $\langle \hat{X} \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle$, sendo $|\psi_R\rangle$ o estado rodado e $|\psi\rangle$ o estado original

Esperamos ter o mesmo para os

Valores esperados de $\hat{P}$,

$$\langle \hat{P}_x \rangle_R = \langle \hat{P}_x \rangle \cos\phi - \langle \hat{P}_y \rangle \operatorname{sen}\phi ,$$

$$\langle \hat{P}_y \rangle_R = \langle \hat{P}_x \rangle \operatorname{sen}\phi + \langle \hat{P}_y \rangle \cos\phi ,$$

$$\langle \hat{P}_z \rangle_R = \langle \hat{P}_z \rangle .$$

<u>Como actuará $\hat{R}_z(\phi)$</u>, op. rotação infi. em torno de Oz, <u>nos kets $|x,y,z\rangle$</u>?

↳ Esperamos que forma mais geral seja

$$\hat{R}_z(\phi)|x,y,z\rangle = e^{ig(x,y,z)}|x\cos\phi - y\operatorname{sen}\phi, x\operatorname{sen}\phi + y\cos\phi, z\rangle$$

É possível mostrar que podemos ignorar a fase (argumentos semelhantes ao caso das translações) e então teremos

$\cos\phi \simeq 1 + O(\varepsilon^2)$
$\operatorname{sen}\phi \simeq \varepsilon + O(\varepsilon^2)$

$$\hat{R}_z(\varepsilon)|x,y,z\rangle = |x - y\varepsilon, y + x\varepsilon, z\rangle .$$

Para construir $\hat{R}_z(\varepsilon)$ devemos elencar algumas das suas propriedades:

(i) $\left[\hat{R}_z(\varepsilon)\right]^{+} \cdot \hat{R}_z(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}}$

(ii) $\hat{R}_z(\eta) \cdot \hat{R}_z(\varepsilon) = \hat{R}_z(\eta+\varepsilon)$

(iii) $\hat{R}_z(-\varepsilon) = \left[\hat{R}_z(\varepsilon)\right]^{-1}$

(iv) $\lim\limits_{\varepsilon \to 0} \hat{R}_z(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}}$,

e tal como anteriormente, se escrevermos $R_z(\varepsilon)$ como

$$\boxed{\hat{R}_z(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{J}_z},$$

onde ε é real e $\hat{J}_z$ é hermítico, obedeceremos automaticamente a estas propriedades.

<u>Mas</u> <u>qual deverá ser</u> $\hat{J}_z$?

$\mathbb{1} = \int |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\,d\vec{r}$

o sinal troca por uma razão das translações

Usando $\langle\vec{r}|\hat{R}_z(\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(x \pm y\varepsilon, y \mp x\varepsilon, z)$

e expandindo em ε teremos

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{J}_z | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) + \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{\vec{r}} \cdot y\varepsilon + \left.\frac{\partial \psi}{\partial y}\right|_{\vec{r}} \cdot (-x\varepsilon)$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | \hat{J}_z | \psi \rangle = \left[x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right) - y\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\right] \psi(\vec{r})$$

que é nada mais do que o operador momento angular orbital ao longo de z escrito na representação das posições

$$\hat{J}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = \hat{L}_z$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{R}_z(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{L}_z}$$

<u>Nota</u>: Análogo a M. Clássica.

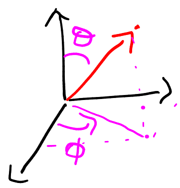
<u>Nota</u>: Podemos mostrar, da mesma forma, que geradores de $\hat{R}_x(\varepsilon)$ e $\hat{R}_y(\varepsilon)$ são $\hat{L}_x$ e $\hat{L}_y$.

<u>Nota</u>: Podemos mostrar que estas formas dão as transformações esperadas por os valores es-

perados $\langle\hat{X}\rangle$, $\langle\hat{Y}\rangle$, $\langle\hat{Z}\rangle$, $\langle\hat{P}_x\rangle$, $\langle\hat{P}_y\rangle$ e $\langle\hat{P}_z\rangle$

Note: Podemos mostrar que o operador $\hat{L}_z$, quando escrito na repres. das posições em coordenadas esféricas tem a forma

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$



onde ϕ é ângulo azimutal.

Note: Se hamiltoniano for invariante por rotações em torno de O_x, O_y e O_z, ele comutará com os geradores $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$.

Podemos generalizar esta forma para rotações em torno de eixo arbitrário $\vec{n}$,

$$\boxed{\hat{R}_{\vec{n}}(\epsilon) = \hat{1} - \frac{i\epsilon}{\hbar}\vec{n}\cdot\vec{J}}$$

de onde, tal como antes, podemos escrever o operador de rotações finitos em torno de $\vec{n}$ como

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\theta) = \lim_{N\to\infty} \left[\hat{R}_{\vec{n}}(\theta/N) \right]^N$$

$$= \lim_{N\to\infty} \left[\hat{1} - \frac{i\theta}{\hbar} \vec{n}\cdot\hat{\vec{J}} \right]^N$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\hat{R}_{\vec{n}}(\theta) = e^{-i\theta\,\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}/\hbar}}$$

$$= \hat{1} - \frac{i\theta}{\hbar}\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}} + \dots$$

Nota: Estamos a usar $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ e $\hat{J}_z$ como forma de sublinhar que o momento angular é algo mais geral do que $\hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{P}}$. Veja-se o exemplo do spin (momento angular intrínseco) que nada tem a ver com $\vec{R}$ ou $\vec{P}$.

Mas quais as consequências de as rotações ao longo de eixos diferentes não comutarem entre si?

Usemos matrizes rotação anteriores

$$\underbrace{R_x(\varepsilon).R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon)}_{\substack{\shortparallel \\ [R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)]}} = \begin{bmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1}$$

Podemos escrever em termos de opera-
dores de rotação

$$[\hat{R}_x(\varepsilon), \hat{R}_y(\varepsilon)] = \hat{R}_z(\varepsilon^2) - \hat{\mathbb{1}} \quad ,$$

que podemos expandir em ε como

$$\Leftrightarrow \left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{J}_x + \dots\right)\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{J}_y + \dots\right) - \left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{J}_y + \dots\right)\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{J}_x + \dots\right)$$

$$= \left(\cancel{\hat{\mathbb{1}}} - \frac{i\varepsilon^2}{\hbar}\hat{J}_z + \dots\right) - \cancel{\hat{\mathbb{1}}}$$

$$\Leftrightarrow -\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\cancel{\hat{J}_x} + \cancel{\hat{J}_y} - \cancel{\hat{J}_x} - \cancel{\hat{J}_y}\right) - \frac{\cancel{\varepsilon^2}}{\hbar^2}\left(\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x\right) + O(\varepsilon^3) =$$

$$= -\frac{i\cancel{\varepsilon^2}}{\hbar}\hat{J}_z + O(\varepsilon^3)$$

$$\Leftrightarrow \hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x = i\hbar J_z$$

$$\Leftrightarrow \boxed{[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z}$$

que é relação comutação para o momento angular (já visto antes).

Podemos mostrar $[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x$, bem como $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$ que pode ser condensado em

$$\boxed{[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \, \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k}$$

onde $\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 \, , \text{ se } ijk = (1,2,3) = (2,3,1) = (3,1,2) \, , \\ -1 \, , \text{ se } ijk = (1,3,2) = (3,2,1) = (2,1,3) \, , \\ 0 \, , \text{ se algum índice repetido.} \end{cases}$

<u>Nota</u>: As relações de comutação do momento angular resultam directamente do facto de os op. momento angular serem os geradores das rotações, e de estas não comutarem (rotações em torno de diferentes eixos).

<u>Nota</u>: O conjunto das rotações formam um grupo, i.e. o conjunto $\{R_i\}$ com operação de combinação de dois elementos com as seguintes propriedades:

(i) existência de identidade, $R_i \mathbb{1} = R_i$.

(ii) cada elemento tem inverso, $R_i R_i^{-1} = R_i^{-1} R_i = 1\!\!1$.

(iii) conjunto fechado, i.e. $R_i, R_j \in G$ então $R_i R_j = R_k$ e $R_k \in G$.

(iv) associatividade, i.e. $R_i R_j R_j = (R_i R_j) R_k = R_i (R_j R_k)$.

que quando os geradores não comutam é chamado de grupo não-abeliano, sendo chamado de grupo abeliano quando os seus geradores comutam.

Note: Rotações e translações, sendo grupos contínuos, são exemplos de grupos de Lie, cujos geradores formam uma álgebra de Lie.

Note: Como $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ e $\hat{L}_z$ não comutam, eles não poderão fazer parte de um mesmo C.C.O.C.. Se estes comutarem com $\hat{H}$, iremos escolher apenas um deles para formar C.C.O.C. com o $\hat{H}$. Mais, como os $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ não comutam, não os poderemos medir simultaneamente com precisão arbitrária.