

## Simetria

São poucos os problemas reais com soluções simples. As dificuldades surgem devido: (1) à complexidade dos potenciais envolvidos e, de um modo geral, (2) aos desafios para solucionar equações envolvendo muitos corpos. Isso vale tanto para a Mecânica Clássica quanto para Mecânica Quântica. Na disciplina FI002 (capítulo 5, do livro texto), estudaremos os chamados métodos perturbativos e variacionais para simplificar problemas e extrair soluções que consigam minimamente descrever a realidade. Nesta aula introduzimos formas de simplificar problemas, prestando atenção nas simetrias existentes no sistema. Onde encontramos simetrias?

*alguns exemplos  
e têm muitos outros!*

- 1) Em problemas que permanecem iguais quando realizamos uma rotação de  $\varphi$  graus;
- 2) Em problemas que permanecem iguais quando refletimos todas as coordenadas com respeito à um plano ou
- 3) quando invertemos as coordenadas ou combinamos operações de rodar e inverter e projetar;
- 4) Em problemas onde parte das partículas são idênticas (têm a mesma massa, spin, carga, etc.);
- 5) Em problemas que permanecem iguais quando invertemos a flecha do tempo; 6) ...

## Simetrias na Física Clássica

Discutiremos apenas um exemplo de simetria que produz uma lei de conservação:

Uma vez conhecida a Lagrangeana  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$ , sabemos que 
$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \\ p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \end{cases}$$

Se  $\mathcal{L}$  não muda com  $q_i$  (a Lagrangeana não muda quando  $q_i$  é substituída por  $q_i + dq_i$ ), então:  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \therefore \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{dp_i}{dt} = 0 \therefore p_i = \text{cte.}$  Ou seja,  $p_i$  é

“conservado”. Note que poderíamos ter concluído a mesma coisa pela

Hamiltoniana  $\mathcal{H} = \sum p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} = \mathcal{H}(q_i, p_i, t)$  onde 
$$\begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \end{cases}$$

Se  $\mathcal{H}$  não muda com deslocamento  $\implies \frac{dp_i}{dt} = 0$  e  $\therefore p_i = \text{cte.}$  Ou seja,  $p_i$  é “conservado.”

Uma simetria: “ $\mathcal{L}$  e  $\mathcal{H}$  não mudam com o deslocamento,” induz uma lei de conservação (no caso a do momento linear).

## Simetrias na Mecânica Quântica

Seja  $\Upsilon$ , um operador unitário  $1 - i\epsilon \frac{G}{\hbar}$

associado à operação de  $\begin{cases} \text{transladar: } G = \mathbf{p} \cdot \mathbf{n} \\ \text{rodar: } G = \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \end{cases}$

Chamaremos  $\Upsilon$  de operador de simetria mesmo quando o sistema não tem a simetria correspondente. Se  $H$  é invariante sob  $\Upsilon \implies \Upsilon^\dagger H \Upsilon = H$ , ou seja

$(1 + i\epsilon \frac{G}{\hbar}) H (1 - i\epsilon \frac{G}{\hbar}) = H \implies GH - HG = 0 \rightarrow [G, H] = 0$  e a equação de

Heisenberg nos ensina que  $\frac{dG}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [G, H] = 0$  e  $\therefore G$  é uma constante de movimento. Ou seja, Se

$H$  é invariante sob a operação de  $\begin{cases} \text{translação} \implies \text{Momento Linear é constante de movimento.} \\ \text{rotação} \implies \text{Momento Angular é constante de movimento.} \\ \text{etc.} \end{cases}$

## Simetrias na Mecânica Quântica

Note que se  $[G, H] = 0$  e  $G|g'\rangle = g'|g'\rangle$  então  $|g', t_o; t\rangle = U(t_o, t)|g'\rangle$  é tal que  $G|g', t_o; t\rangle = GU(t_o, t)|g'\rangle = U(t_o, t)G|g'\rangle = U(t_o, t)g'|g'\rangle = g'|g', t_o; t\rangle$ , ou seja

$$G|g', t_o; t\rangle = g'|g', t_o; t\rangle$$

Isto significa que, se o sistema é colocado em  $|g'\rangle$ , um autoket de  $G$ , em um dado instante, a qualquer instante no futuro, o estado do sistema estará em um autoket de  $G$  com o mesmo autovalor!

Lembre que  $U|g'\rangle = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}(t - t_o)\right)|g'\rangle = \exp\left(-i\frac{E_{g'}}{\hbar}(t - t_o)\right)|g'\rangle$  e que para todos os efeitos  $|g', t_o; t\rangle$  é o próprio  $|g'\rangle$  (eles diferem por uma fase).

### Degenerescência

Se  $[H, \Upsilon] = 0$  então  $H\Upsilon|n\rangle = \Upsilon H|n\rangle = E_n\Upsilon|n\rangle$  ou seja,  $\Upsilon|n\rangle$  é um auto-estado de  $H$  com o mesmo autovalor de energia que o  $|n\rangle$ . Desta forma, se  $\Upsilon|n\rangle$  e  $|n\rangle$  forem estados diferentes (o que para nós significa  $\Upsilon|n\rangle \neq c|n\rangle$ ) então, eles serão degenerados.

## Simetrias na Mecânica Quântica

Suponha  $[D(R), H] = 0$ . Isto implica em  $[\mathbf{J}, H] = 0$  e  $[\mathbf{J}^2, H] = 0$ . Escolha  $H$ ,  $\mathbf{J}^2$ , e  $J_z$  para construir  $\{|n; jm\rangle\}$ , uma base de autokets simultâneos destes 3 operadores.

O slide anterior nos ensinou que o sistema em  $D(R)|n; jm\rangle$  tem a mesma energia que o sistema no estado  $|n; jm\rangle$ . Vimos também que:

$$D(R)|n; j, m\rangle = \sum_{m'} |n; jm'\rangle \underbrace{\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)}$$

Isto é caracterizado  
por um parâmetro que  
varia continuamente

Se rodando continuamente (em qualquer direção) obtemos sempre um autoestado com a mesma energia, conclui-se que: todos os  $|n; jm'\rangle$  com  $m's$  diferentes, tenham a mesma energia. Ou seja, existe uma degenerescência  $(2j + 1)$  na energia, entre os estados  $|n; jm\rangle$  com  $n$  e  $j$  fixos e  $-j \leq m \leq j$ .

**Exemplo:**

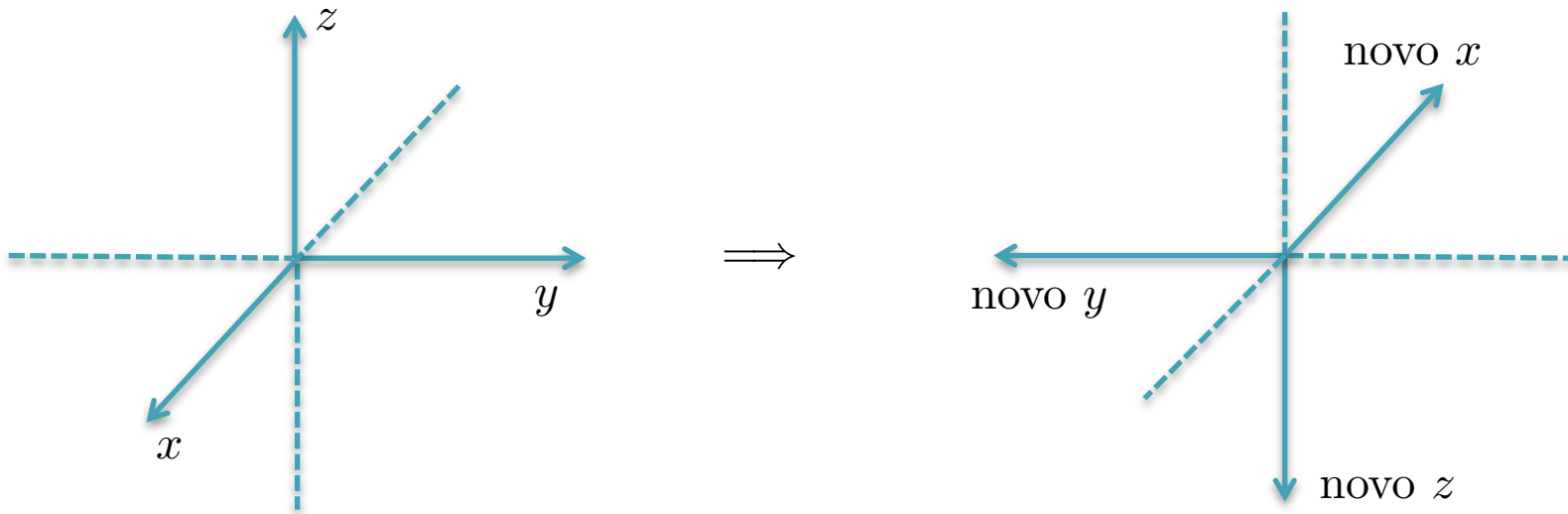
$V = V(r) + V_{LS}(r) \underbrace{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}$  comuta com  $\mathbf{J}$  e  $\therefore$  tem uma degenerescência de  $2j + 1$ .

$$\frac{J^2 - L^2 - S^2}{2}$$

## Simetrias discretas, paridade (inversão espacial)

Até aqui  $\Upsilon = 1 - i\epsilon \frac{G}{\hbar}$  com  $\epsilon$  variando continuamente. Nem sempre é assim!

**Exemplo:** Paridade ou Inversão Espacial



Muda de RMD  
Regra da mão direita

para RME  
Regra da mão esquerda

Neste curso (Sakurai&Napolitano) temos adotado transformações nos kets e não no sistema de coordenadas. Assim, definiremos  $\underbrace{\pi}$ , tal que  $|\alpha\rangle \rightarrow \pi|\alpha\rangle$

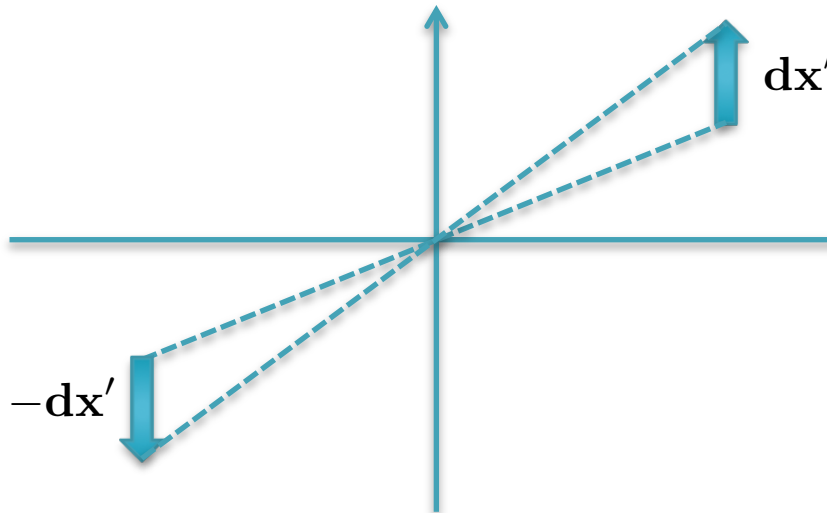
operador  
de paridade

Por definição:  $\langle\alpha|\pi^\dagger \mathbf{x} \pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle$  e como vale para qualquer  $|\alpha\rangle$ , temos:  $\pi^\dagger \mathbf{x} \pi = -\mathbf{x}$  e como  $\pi^\dagger \pi = \pi \pi^\dagger = 1$ , podemos escrever  $\mathbf{x} \pi = -\pi \mathbf{x}$

## Paridade

Note que o ket  $\pi|\mathbf{x}'\rangle$  é autoket de  $\mathbf{x}$ , pois  $\mathbf{x}\pi|\mathbf{x}'\rangle = -\pi\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = -\mathbf{x}'\pi|\mathbf{x}'\rangle$ . Ou seja,  $\pi|\mathbf{x}'\rangle$  é autoket de  $\mathbf{x}$  com autovalor  $-\mathbf{x}'$ . Assim, é possível escrever que:  $\pi|\mathbf{x}'\rangle = e^{i\delta} |-\mathbf{x}'\rangle$ . Adota-se  $\delta = 0$ . Note também que  $\pi^2|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$  e  $\therefore \pi^2 = 1$ . Assim, como  $\pi^\dagger = \pi^\dagger \pi^2 = \underbrace{\pi^\dagger \pi}_1 \pi = \pi$  e  $\therefore \pi^\dagger = \pi$  e ainda  $\pi^{-1} = \pi$ .

E o  $\mathbf{p}$ ? Se  $\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{x}}{dt}$  deveríamos esperar que  $\mathbf{p}$  seja ímpar (anticomutação) mediante a operação de paridade. Uma outra forma de ver isso é observar que: translação seguida de paridade é equivalente a paridade seguida de translação no sentido oposto (ver figura).



Essa propriedade pode ser escrita na forma:

$$\pi \mathfrak{S}(\mathbf{dx}') = \mathfrak{S}(-\mathbf{dx}') \pi$$

$$\pi \left(1 - i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{dx}'}{\hbar}\right) = \left(1 + i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{dx}'}{\hbar}\right) \pi,$$

ou seja,  $\{\pi, \mathbf{p}\} = 0 \rightarrow \pi^\dagger \mathbf{p} \pi = -\mathbf{p}$

**J sob Paridade**Caso (1):  $\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 

$$[\pi, \mathbf{L}] = [\pi, \mathbf{x} \times \mathbf{p}] = 0, \text{ pois } \begin{cases} \pi \mathbf{x} = -\mathbf{x} \pi \\ \pi \mathbf{p} = -\mathbf{p} \pi \end{cases} \therefore \pi \mathbf{x} \times \mathbf{p} = -\mathbf{x} \times \pi \mathbf{p} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \pi$$

Caso (2):  $\forall \mathbf{J}$ , usando operador de rotações.Para rodar vetores na Mecânica Clássica, usamos  $R^{\text{rotação}}$  e para paridade

$$R^{\text{paridade}} = \begin{pmatrix} -1 & & 0 \\ & -1 & \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Note que  $R^{\text{rotação}} R^{\text{paridade}} = R^{\text{paridade}} R^{\text{rotação}}$ .Para rodar kets na Mecânica Quântica, teremos:  $\pi D(R) = D(R) \pi$ .Para o caso infinitesimal, onde  $D(R) = 1 - i\epsilon \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}}{\hbar} \rightarrow [\pi, \mathbf{J}] = 0$  ou  $\pi^\dagger \mathbf{J} \pi = \mathbf{J}$ .Note que  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{J}$  transformam do mesmo jeito sob rotação, pois ambos são tensores esféricos de primeira ordem. Sob paridade um é par outro é ímpar.

$$\text{Assim, } \begin{cases} \mathbf{x} \text{ e } \mathbf{p} \rightarrow \text{ímpares sob paridade} \rightarrow \text{vetores polares} \\ \mathbf{J} (\mathbf{L} \text{ e } \mathbf{S}) \rightarrow \text{pares sob paridade} \rightarrow \text{vetores axiais (pseudovetores)} \\ \pi^{-1} \mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \pi = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \rightarrow \text{pseudoescalar} \\ \pi^{-1} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \pi = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rightarrow \text{escalar ordinário como } \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \end{cases}$$



## Funções de onda mediante Paridade

Primeiro, vamos tratar partículas sem spin, onde  $\psi(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$ . Como ficaria  $\pi|\alpha\rangle$ ?  $\langle \mathbf{x}' | \pi|\alpha\rangle = \langle -\mathbf{x}' | \alpha \rangle = \psi(-\mathbf{x}')$ . Se  $|\alpha\rangle$  for um autoket de  $\pi$ , então  $\pi|\alpha\rangle = \underbrace{\pm}_{\substack{\text{únicos autovalores} \\ \text{possíveis, pois } \pi^2=1}} |\alpha\rangle$ .

Ou seja  $\langle \mathbf{x}' | \pi|\alpha\rangle = \pm \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \implies \psi(-\mathbf{x}') = \pm \psi(\mathbf{x}')$ . As funções são pares ou ímpares, ou seja, elas têm paridade bem definida. Como  $[\mathbf{p}, \pi] \neq 0$  (lembre que  $\{\mathbf{p}, \pi\} = 0$ ) autofunções de  $\mathbf{p}$  podem não ser de  $\pi$ . Por exemplo, a onda plana  $e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}}$  não tem paridade bem definida.

Note, entretanto, que  $[\mathbf{L}, \pi] = 0 \therefore \langle \mathbf{x}' | \alpha; \ell m \rangle = R_\alpha(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  deve ter

$$\text{quando trocamos } \mathbf{x}' \text{ por } -\mathbf{x}' \begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \text{ que resulta em } \cos \theta \rightarrow -\cos \theta \\ \varphi \rightarrow \varphi + \pi \text{ que resulta em } e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} \end{cases}$$

Como  $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ , onde  $m \geq 0$  e

$$P_\ell^{|m|}(\cos \theta) = \frac{(-1)^{m+\ell} (\ell + |m|)!}{2^\ell \ell! (\ell - |m|)!} \sin^{-|m|} \theta \left( \frac{d}{d(\cos \theta)} \right)^{\ell - |m|} \sin^{2\ell} \theta, \text{ é fácil}$$

ver que  $Y_\ell^m \rightarrow (-1)^\ell Y_\ell^m \implies \pi|\alpha; \ell m\rangle = (-1)^\ell |\alpha; \ell m\rangle$

## Funções de onda mediante Paridade

A paridade das autofunções de  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$  poderia ter sido obtida de forma mais simples, notando que  $(L_{\pm})^r |\ell 0\rangle$ , com  $r = 0, 1, 2, \dots$ , tem a mesma paridade que  $|\ell 0\rangle$ . Isto porque, se  $\lambda (= \pm 1)$  é a paridade de  $|\ell 0\rangle$ , isto é:

$\pi |\ell 0\rangle = \lambda |\ell 0\rangle$ , então, podemos multiplicar esta equação por  $(L_{\pm})^r$  e obter:

$$\underbrace{(L_{\pm})^r \pi}_{\text{comutam}} |\ell 0\rangle = \underbrace{(L_{\pm})^r \lambda}_{\lambda \text{ é número}} |\ell 0\rangle \implies \pi \underbrace{(L_{\pm})^r}_{\text{autoket de } \pi \text{ com o mesmo autovalor } \lambda} |\ell 0\rangle = \lambda \underbrace{(L_{\pm})^r}_{\text{autoket de } \pi \text{ com o mesmo autovalor } \lambda} |\ell 0\rangle$$

comutam  $\lambda$  é número autoket de  $\pi$  com o mesmo autovalor  $\lambda$

Com isso basta estudar a paridade de  $P_{\ell}^0(\cos \theta)$  e concluir que:

$$Y_{\ell}^m(-\mathbf{r}) = (-1)^{\ell} Y_{\ell}^m(\mathbf{r})$$

### Teorema

Se  $[H, \pi] = 0$  e  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ , então, se  $E_n$  é não degenerado,  $|n\rangle$  tem paridade bem definida.

### Demonstração

Queremos mostrar que  $\pi|n\rangle = \lambda|n\rangle$  com  $\lambda = \pm 1$ . Primeiro, note que

$\frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle$  é autoket de  $\pi$  com autovalor  $\lambda$ . Para ver isso aplique  $\pi$  e obtenha

$$\pi \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle = \frac{1}{2}(\pi \pm \pi^2)|n\rangle = (\pm 1) \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle$$

Em seguida, vamos mostrar que  $|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle$  é o próprio  $|n\rangle$ .

## Funções de onda mediante Paridade

Para isso aplique  $H$  em  $|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle$  e obtenha:

$$H \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \pi)H|n\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \pi)E_n|n\rangle = E_n \frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle.$$

Ou seja,  $H|\alpha\rangle = E_n|\alpha\rangle$ . Se  $E_n$  é não degenerado, então  $|\alpha\rangle = |n\rangle$ .

Observe que a hipótese de  $E_n$  não-degenerado é importante. Para isso pense no átomo de hidrogênio onde os níveis  $2s$  e  $2p$  são degenerados. Uma combinação destes kets seria autoestado de  $H$ , mas não seria um autoestado de  $\pi$ .

Finalmente, note que se considerarmos

$$\frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle = |n\rangle \text{ temos, } (1 \pm \pi)|n\rangle = 2|n\rangle \implies \pi|n\rangle = \pm|n\rangle$$

### Exemplo 1: Oscilador Harmônico Simples

$|0\rangle$  é par (Gaussiana), mas  $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$  é ímpar, pois  $a^\dagger$  é uma mistura de  $x$  e  $p$  (ambos ímpares). Daí concluí-se que  $|n\rangle$  tem paridade  $(-1)^n$ .

## Funções de onda mediante Paridade

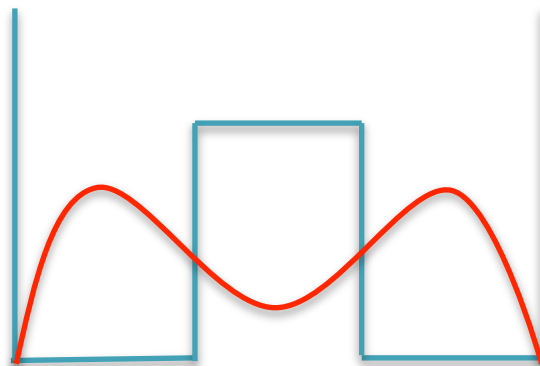
### Exemplo 2: Ondas livres.

Embora  $H = \frac{p^2}{2m}$  comuta com  $\pi$ , os autovalores  $\frac{p'^2}{2m}$  são degenerados e as autofunções correspondentes podem não ser autofunções de  $\pi$ .

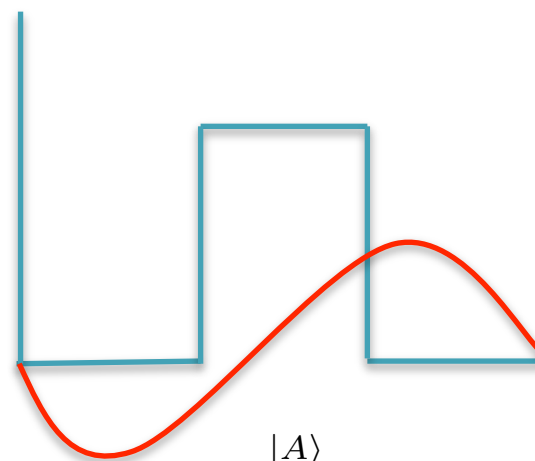
Repare, entretanto, que embora  $e^{\pm i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}}$  não tenham paridade bem definida,

$$\left. \begin{array}{l} \text{as combinações no} \\ \text{subespaço degenerado} \end{array} \right\} \begin{cases} \cos \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} = \frac{e^{+i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} + e^{-i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}}}{2} \\ \sin \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} = \frac{e^{+i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} - e^{-i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}}}{2i} \end{cases} \quad \text{têm paridade bem definida.}$$

### Exemplo 3: Potencial de poço duplo simétrico.



$|S\rangle$   
solução simétrica



$|A\rangle$   
solução antisimétrica

## Paridade: Potencial de poço duplo simétrico

As soluções nas regiões classicamente  $\begin{cases} \text{permitidas} \implies \text{são do tipo sin e cos} \\ \text{proibidas} \implies \text{são do tipo sinh e cosh} \end{cases}$

Cálculos mostram que  $E_A > E_S$ , mas se a barreira interna (BI) é alta  $E_A \approx E_S$ .

Considere  $\begin{cases} |D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle) \\ |E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle) \end{cases}$  onde,  $|D\rangle$  e  $|A\rangle$  não são autoestados  
(exceto p/ BI infinito)

Note que  $|D\rangle$  ( $|E\rangle$ ) representa uma partícula com mais chances de estar do lado direito (esquerdo). Suponha, agora  $|\Psi\rangle = |D\rangle$  para  $t = 0$ . No futuro, teríamos:

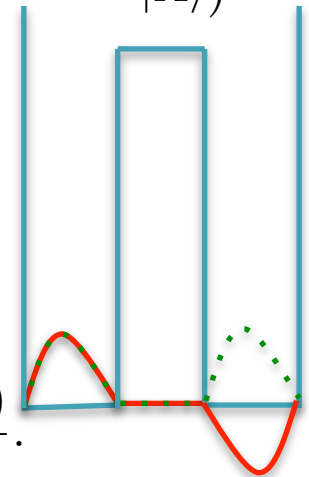
$$|D, t_0 = 0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}} |S\rangle + e^{-i\frac{E_A t}{\hbar}} |A\rangle \right) = \frac{e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}}}{\sqrt{2}} \left( |S\rangle + e^{-i\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}} |A\rangle \right)$$

$$\text{Suponha } T = \frac{2\pi}{\frac{(E_A - E_S)}{\hbar}} = \frac{2\pi\hbar}{(E_A - E_S)}$$

$$\text{Em } \begin{cases} t = T/2 \rightarrow e^{-i\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}} = e^{-i\pi} = -1 \implies |D, t_0; T/2\rangle = |E\rangle \\ t = T \rightarrow e^{-i\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}} = e^{-i2\pi} = 1 \implies |D, t_0; T\rangle = |D\rangle \end{cases}$$

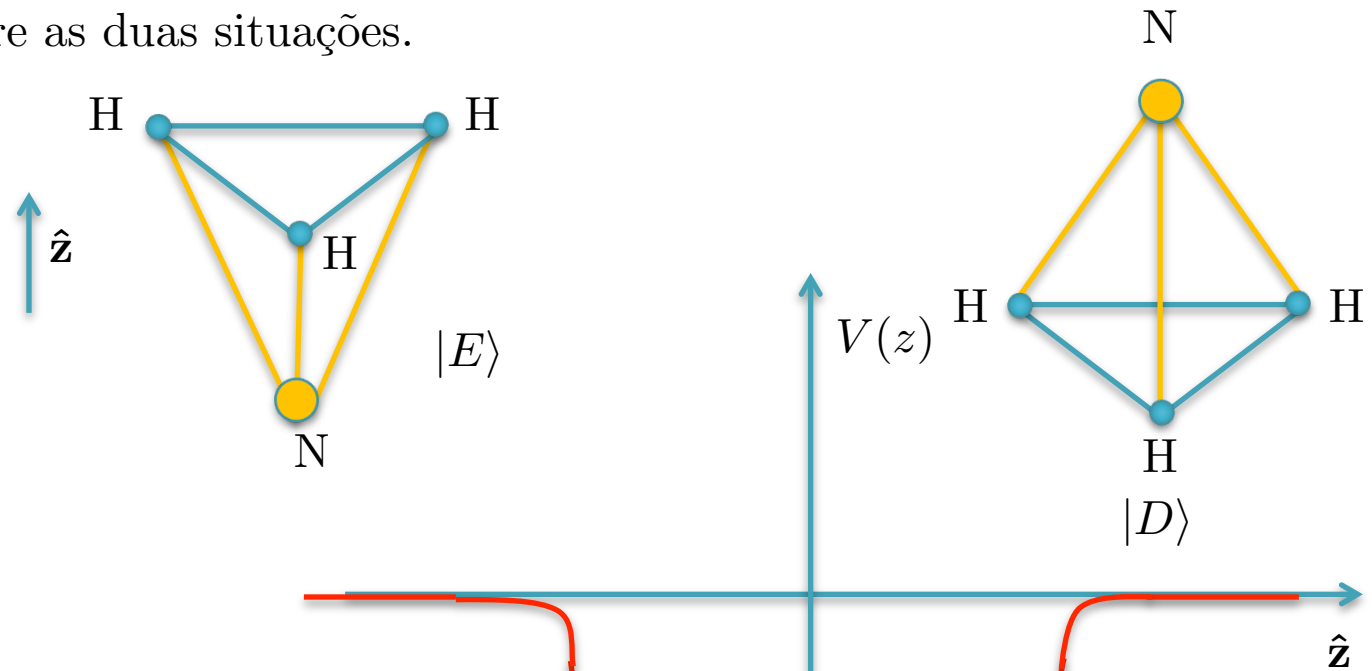
Oscilações entre  $|E\rangle$  e  $|D\rangle$  com frequência angular  $\omega = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}$ .

Se  $BI \rightarrow \infty$ ,  $E_A \sim E_S \rightarrow \omega \sim 0$  e  $T \rightarrow \infty$ .  $|D\rangle$  e  $|E\rangle$  ficam autoestados e duram para sempre. Lembre que quando há degenerescência as funções não precisam ter paridade bem definida, mesmo quando  $[H, \pi] = 0$ .



## Molécula de Amônia: um potencial de poço duplo simétrico

A natureza apresenta muitos poços duplos simétricos. A molécula de  $\text{NH}_3$  é um bom exemplo. O sistema é mais estável quando N está para cima ou para baixo e menos estável quando está bem no meio do triângulo isósceles que caracteriza os 3 átomos de hidrogênio. O estado real é uma mistura e “oscila” entre as duas situações.



Frequência de Oscilação  
 $\omega = 24000 \text{ MHz}$  ( $\lambda = 1 \text{ cm}$ )

N para baixo      N para cima