

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 φ graus ao redor de um eixo (ou \forall eixo);
- 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 Υ , 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 Υ 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:

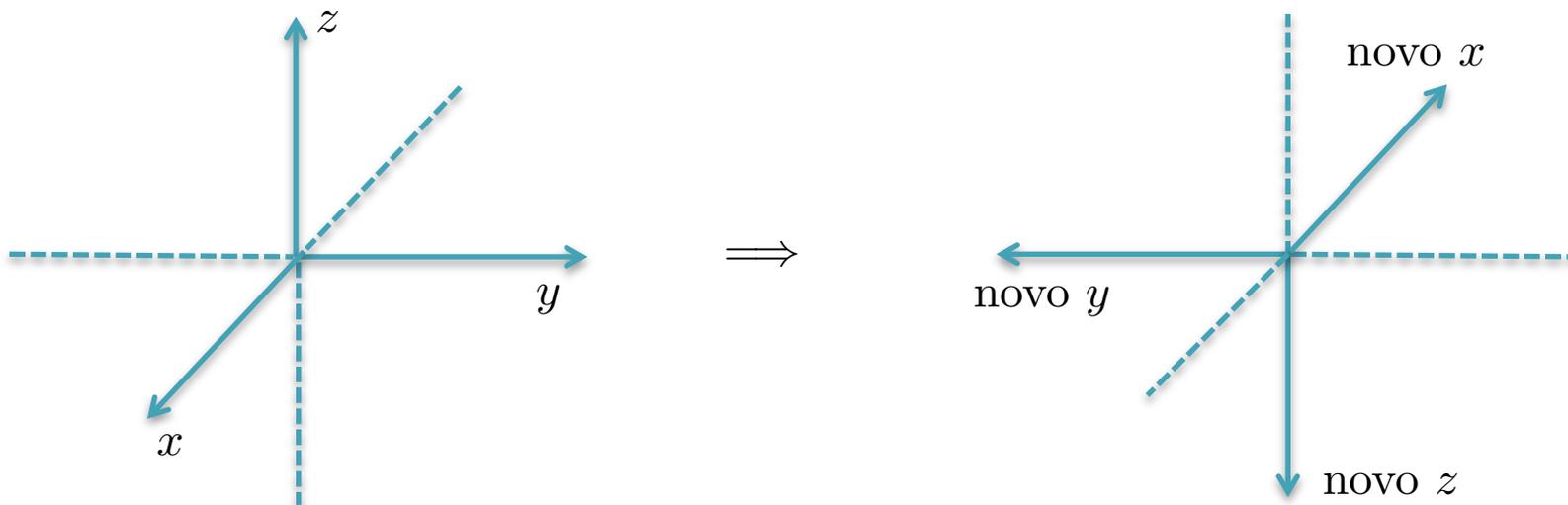
$V = V(r) + V_{LS}(r) \underbrace{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}$ comuta com \mathbf{J} e \therefore tem uma degenerescência de $2j + 1$.

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

Simetrias discretas, paridade (inversão espacial)

Até aqui $\Upsilon = 1 - i\epsilon \frac{G}{\hbar}$ com ϵ 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 $|\alpha\rangle \rightarrow \pi|\alpha\rangle$

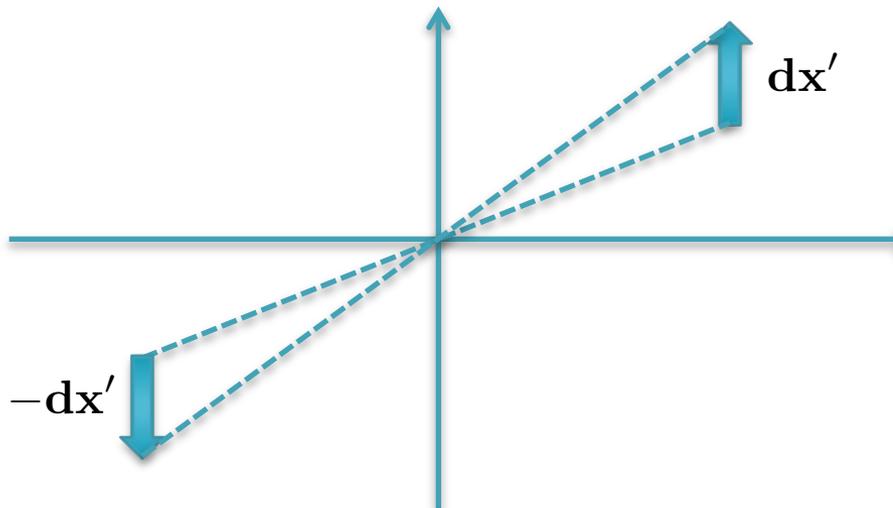
operador
de paridade

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): $\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$

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

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 π , então $\pi | \alpha \rangle = \underbrace{\pm}_{\substack{\text{únicos autovalores} \\ \text{possíveis, pois } \pi^2=1}} | \alpha \rangle$.

únicos autovalores
possíveis, pois $\pi^2=1$

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 π . 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

quando trocamos \mathbf{x}' 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

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

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

combine

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:

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

comutam λ é número autoket de π com o mesmo autovalor λ

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 π com autovalor λ . Para ver isso aplique π 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 π .

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 conclui-se que $|n\rangle$ tem paridade $(-1)^n$.

Funções de onda mediante Paridade

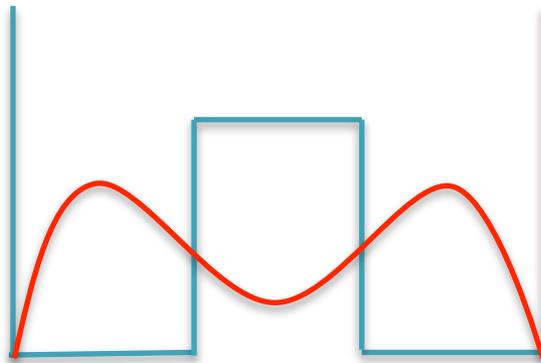
Exemplo 2: Ondas livres.

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

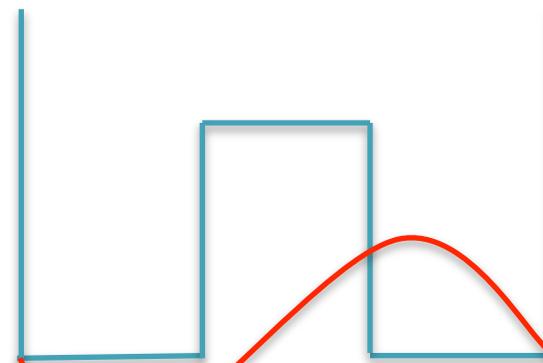
Repare, entretanto, que embora $e^{\pm i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}}$ não tenham paridade bem definida,

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

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 $\left\{ \begin{array}{l} \text{permitidas} \implies \text{são do tipo sin e cos} \\ \text{proibidas} \implies \text{são do tipo sinh e cosh} \end{array} \right.$

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

Considere $\left\{ \begin{array}{l} |D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle) \\ |E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle) \end{array} \right.$ 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:

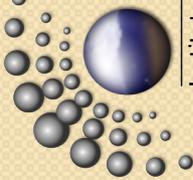
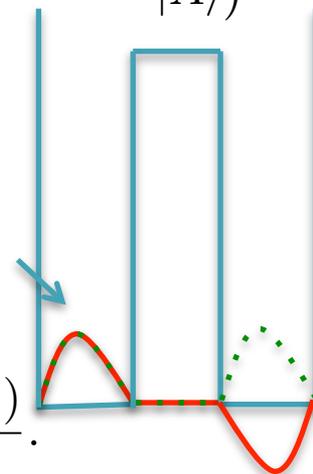
$$|D, t_0 = 0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}} |S\rangle + e^{-i\frac{E_A t}{\hbar}} |A\rangle \right) = \frac{e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}}}{\sqrt{2}} \left(|S\rangle + e^{-i\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}} |A\rangle \right)$$

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

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

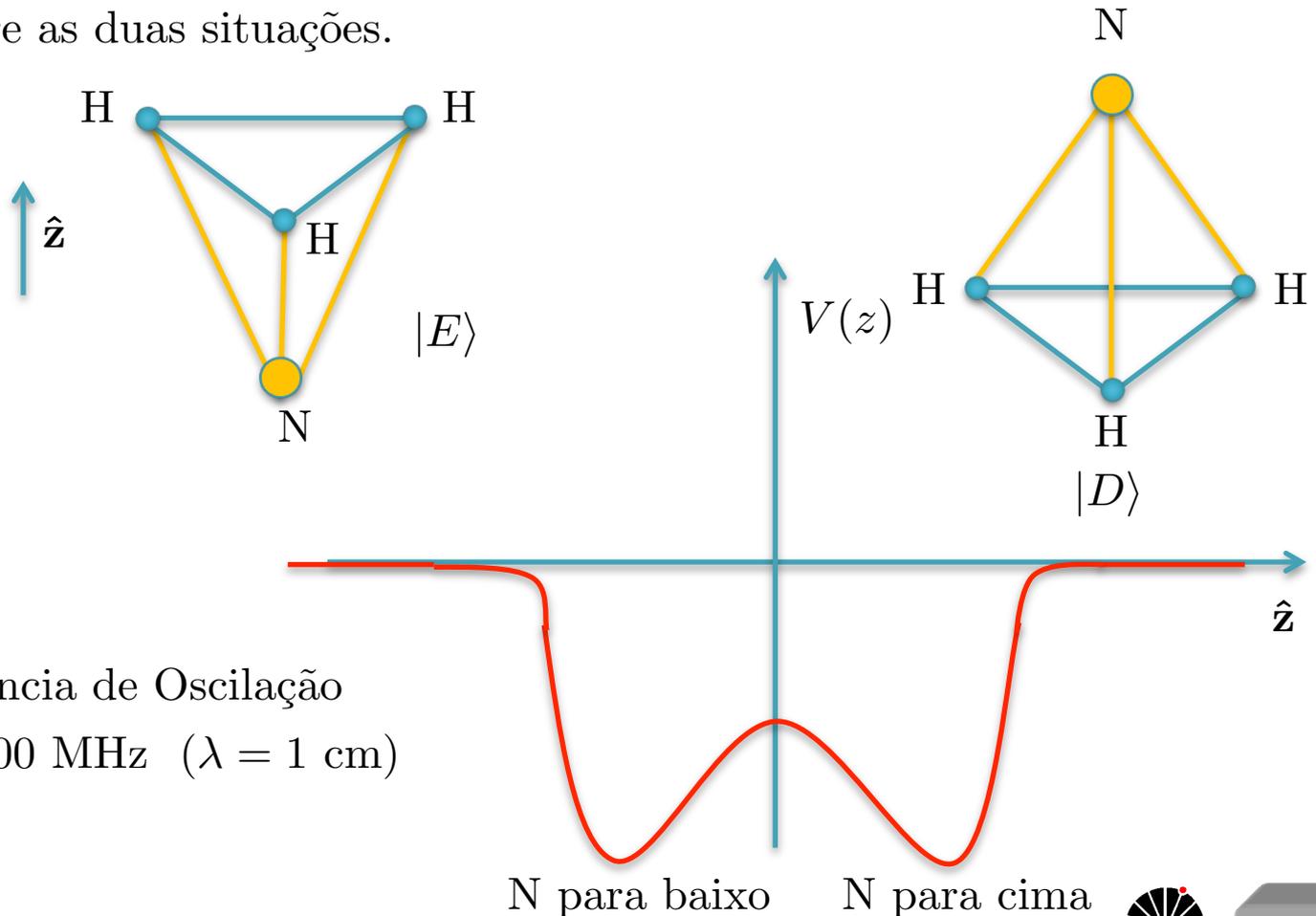
Oscilações entre $|E\rangle$ e $|D\rangle$ com frequência angular $\omega = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}$.

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