SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Encontramos uma degenerescência peculiar no espectro do átomo de hidrogênio. Para a Hamiltoniana $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$, calculamos: $E_n = -\frac{1}{2}mc^2\frac{Z^2\alpha^2}{n^2} = -13.6eV\frac{Z^2}{n^2}$, onde $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ é a constante de estrutura fina e $n = 1, 2, \ldots$. Esse valor de energia, para um dado n, vale para todos os $\ell's$ (e seus $m's$) variando de $0 \leq \ell \leq n-1$.

Isto gera uma degenerescência $= \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2$.

lousa

Ver contribuição da Karine, na aula 24 ou aula 27 de F689.

Tal degenerescência, será apenas acidental?

Na mecânica clássica, aprendemos que as soluções da equação de Newton (ou as de Lagrange) fornecem órbitas fechadas elípticas e que existiria alguma constante de movimento (vetor) que manteria o eixo principal das elipses fixos. Qualquer desvio do potencial $1/r$ faz o eixo precessionar. Assim, espera-se que a constante de movimento seja característica dos potenciais do tipo $1/r$. Classicamente, esta constante de movimento pode ser escrita por: $\mathbf{M} = \frac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}}{m} - \frac{Ze^2}{r}\mathbf{r}$ (Vetor de Lenz ou vetor de Runge-Lenz)

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Qual seria o análogo quântico de $\mathbf{M}$? Primeiro é importante lembrar que, dados dois operadores vetoriais Hermiteanos, $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$, o operador $\mathbf{A}\times\mathbf{B}$ pode não ser Hermiteano, pois $(\mathbf{A}\times\mathbf{B})^\dagger = -\mathbf{B}\times\mathbf{A}$ (mostre! e discuta o caso que é Hermiteano, $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$). Assim, o análogo quântico para um produto vetorial de operadores Hermiteanos (para garantir que também seja Hermiteano) é $\dfrac{\mathbf{A}\times\mathbf{B}-\mathbf{B}\times\mathbf{A}}{2}$. Portanto, a versão Hermiteana da Mecânica Quântica do vetor de Lenz fica $\mathbf{M}=\dfrac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}-\mathbf{L}\times\mathbf{p}}{2m}-\dfrac{Ze^2}{r}\mathbf{r}$.

Voluntário?

Para que $\mathbf{M}$ seja uma "constante de movimento" na mecânica quântica, é preciso que $[\mathbf{M},H]=0$ para $H=\dfrac{\mathbf{p}^2}{2m}-\dfrac{Ze^2}{r}$. Mostre isso. Outras duas relações interessantes são

$$\begin{cases}\mathbf{L}.\mathbf{M}=\mathbf{M}.\mathbf{L}=0\\ \mathbf{M}^2=\frac{2}{m}H(\mathbf{L}^2+\hbar^2)+Z^2e^4\end{cases}$$

Mesmo voluntário!

A álgebra para mostrar estas relações é tediosa, mas direta.

Note, entretanto, que H só aparece no resultado de $\mathbf{M}^2$ porque o $-\dfrac{Ze^2}{r}$ que aparece na definição de $\mathbf{M}$ é o mesmo da Hamiltoniana.

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Como sempre, uma constante de movimento tem origem em uma simetria. A simetria que gera $\mathbf{M}$ é chamada de SO(4), análoga à SO(3) (grupo Ortogonal Especial em 3 dimensões), exceto que ao invés de ser um grupo de rotações em 3 dimensões espaciais, é em 4 dimensões espaciais. Equivalentemente, é um grupo de matrizes ortogonais 4×4 de determinante igual à 1. A idéia é mostrar que as propriedades do SO(4) geram $\mathbf{M}$ como uma constante de movimento da Hamiltoniana do potencial colombiano e que isso acarreta na degenerescência encontrada (não tão acidental!). Para identificar a simetria responsável pela constante de movimento $\mathbf{M}$, é importante revisar álgebra de geradores desta simetria. Com a convenção de que índices repetidos significa índices somados,

considere as relações

$$\begin{cases} [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \text{ (conhecida)} \\ [M_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}M_k. \text{ Mostre e note que deduzimos esta expressão para operadores vetoriais, } [V_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k \\ [M_i, M_j] = -i\hbar\epsilon_{ijk}\frac{2}{m}HL_k. \text{ Mostre. Esta vai ser útil para deduzir o espectro de } H. \end{cases}$$

Novo voluntário? Para os dois "mostre"s

A ideia é perceber que um operador proporcional à **M** é algum tipo de momento angular

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Vamos considerar o problema específico de estados ligados e trocar H na última expressão do slide anterior por $E < 0$. Com esta hipótese é possível simplificar o problema, definindo $\mathbf{N} \equiv \left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}\mathbf{M}$. Assim, lousa

E fixo para estudar a degenerescência

as relações do slide anterior ficam

$$\begin{cases} [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ [N_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}N_k. \\ [N_i, N_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \end{cases}$$

A Pergunta é: qual a operação de simetria gerada por $\mathbf{L}$ e $\mathbf{N}$? Embora, longe de óbvio, a resposta é: rotação em quatro dimensões espaciais. Para perceber isso, note que rodar é misturar dois eixos ortogonais (pense na rotação ao redor de $\hat{\mathbf{z}}$ onde, x e y se misturam). O número de geradores de rotação em um espaço de dimensão n_e é o número de pares de eixos ortogonais deste espaço. Ou seja:

$$C_{n_e,2} = \frac{n_e(n_e-1)}{2} \begin{cases} n_e = 2 \Longrightarrow C_{2,2} = 1 : L_z \\ n_e = 3 \Longrightarrow C_{3,2} = 3 : \mathbf{L}(L_x, L_y, L_z) \\ n_e = 4 \Longrightarrow C_{4,2} = 6 : \mathbf{L} \text{ e } \mathbf{N} \begin{cases} L_x, L_y, L_z \\ N_x, N_y, N_z \end{cases} \end{cases}$$

lousa

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

No espaço tridimensional, vimos que o momento angular orbital $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ é responsável pela rotação (suas componentes, $L_x, L_y,$ e L_z são os geradores de rotação). Vimos isso claramente, quando rodamos um ket genérico $|\alpha\rangle$ ao redor do eixo $\hat{\mathbf{z}}$. Isto é decorrente de ter o operador momento linear $\mathbf{p}$ como gerador de translação no espaço $\Re^3$. Ou seja, combinações do tipo $L_z = xp_y - yp_x$ misturam os eixos x e y, como é esperado de uma rotação ao redor do eixo $\hat{\mathbf{z}}$. Para generalizar para 4 dimensões espaciais,

$$\text{troquemos} \begin{cases} x, y, z \Longrightarrow x_1, x_2, x_3 \\ \\ p_x, p_y, p_z \Longrightarrow p_1, p_2, p_3 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{e escreva} \\ \text{os geradores} \end{matrix} \begin{cases} L_1 = \tilde{L}_{23} = x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ L_2 = \tilde{L}_{31} = x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ L_3 = \tilde{L}_{12} = x_1 p_2 - x_2 p_1 \end{cases}$$

Agora, inventamos uma quarta dimensão x_4 com seu momento conjugado p_4.

$$\text{Isto permite definir} \begin{cases} N_1 \equiv \tilde{L}_{14} = x_1 p_4 - x_4 p_1 \\ N_2 \equiv \tilde{L}_{24} = x_2 p_4 - x_4 p_2 \\ N_3 \equiv \tilde{L}_{34} = x_3 p_4 - x_4 p_3 \end{cases} \quad \text{com } [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Note que $[N_1, L_2] = [x_1 p_4 - x_4 p_1, x_3 p_1 - x_1 p_3] = p_4[x_1, p_1]x_3 + x_4[p_1, x_1]p_3$

E $\therefore [N_1, L_2] = i\hbar(x_3 p_4 - x_4 p_3) = i\hbar N_3$ (conforme queríamos no slide 4).

Mostre que esta definição de $\mathbf{N}$ satisfaz todas as regras de comutação.

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Estamos prontos para usar o que vimos na aula passada, ou seja, se

$$[H, \Upsilon] = 0 \Longrightarrow H\Upsilon|n\rangle = E_n \Upsilon|n\rangle.$$

Isto é: se $|n\rangle$ é autoket de H com autovalor E_n, $\Upsilon|n\rangle$ também é.

Primeiro defina os operadores $\begin{cases} \mathbf{I} \equiv (\mathbf{L} + \mathbf{N})/2 \\ \mathbf{K} \equiv (\mathbf{L} - \mathbf{N})/2 \end{cases}$

As componentes de **N e L** comutam como momento angular. **I e K** também! Conhecemos o espectro deles.

e prove que $\begin{cases} [I_i, I_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} I_k \\ [K_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} K_k \\ [I_i, K_j] = 0 \end{cases}$ Momento angular e depois que $\begin{cases} [\mathbf{I}, H] = 0 \\ [\mathbf{K}, H] = 0 \end{cases}$ lousa

Dois momentos angulares que são constantes de movimento e comutam entre si. Os autovalores de $\mathbf{I}^2$ e $\mathbf{K}^2$ são, respectivamente $i(i+1)\hbar^2$ e $k(k+1)\hbar^2$, com $i, k = 0, 1/2, 1, 3/2 \ldots$. Note também que $\mathbf{I}^2 - \mathbf{K}^2 = \underbrace{\mathbf{L}.\mathbf{N}} = 0$, o que obriga $i = k$.

Lembre que $\begin{cases} \mathbf{N} \propto \mathbf{M} \\ \text{e } \mathbf{L}.\mathbf{M} = 0 \end{cases}$

SO(4): Explorando simetria do potencial colombiano

Finalmente, note que $\mathbf{I}^2 + \mathbf{K}^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2) = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 - \frac{m}{2E}\mathbf{M}^2)$. Com ajuda da última equação do slide 2 para $\mathbf{M}^2$, reproduzida aqui para facilitar, $\mathbf{M}^2 = \frac{2}{m}H(\mathbf{L}^2 + \hbar^2) + Z^2e^4 \rightarrow \frac{m}{2E}\mathbf{M}^2 = \mathbf{L}^2 + \hbar^2 + \frac{Z^2e^4m}{2E}$

temos: $2k(k+1)\hbar^2 = \frac{1}{2}(-\hbar^2 - \frac{Z^2e^4m}{2E})$ que pode ser re-escrita como

$$(4k^2 + 4k + 1)\hbar^2 = (2k+1)^2\hbar^2 = -\frac{Z^2e^4m}{2E},$$

o que permite escrever $E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(2k+1)^2}$. Agora basta fazer $n = 2k + 1$ para reconhecer o espectro obtido pela solução da equação de Schrödinger. Note que a degenerescência obtida por simetria é:

$$(2i+1)(2k+1) = (2k+1)^2 = n^2, \text{ com } k = 0, 1/2, 1, 3/2 \ldots,$$

correspondendo à $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$ respectivamente, e conforme havíamos mostrado pela solução da equação diferencial.

Note que achamos o espectro do átomo de hidrogênio, sem resolver a equação diferencial: apenas explorando a simetria do problema.

Regra de seleção por paridade

Suponha $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ autoestados de paridade: $\begin{cases} \pi|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle \Longrightarrow \epsilon_\alpha = \pm 1 \\ \\ \pi|\beta\rangle = \epsilon_\beta|\beta\rangle \Longrightarrow \epsilon_\beta = \pm 1 \end{cases}$

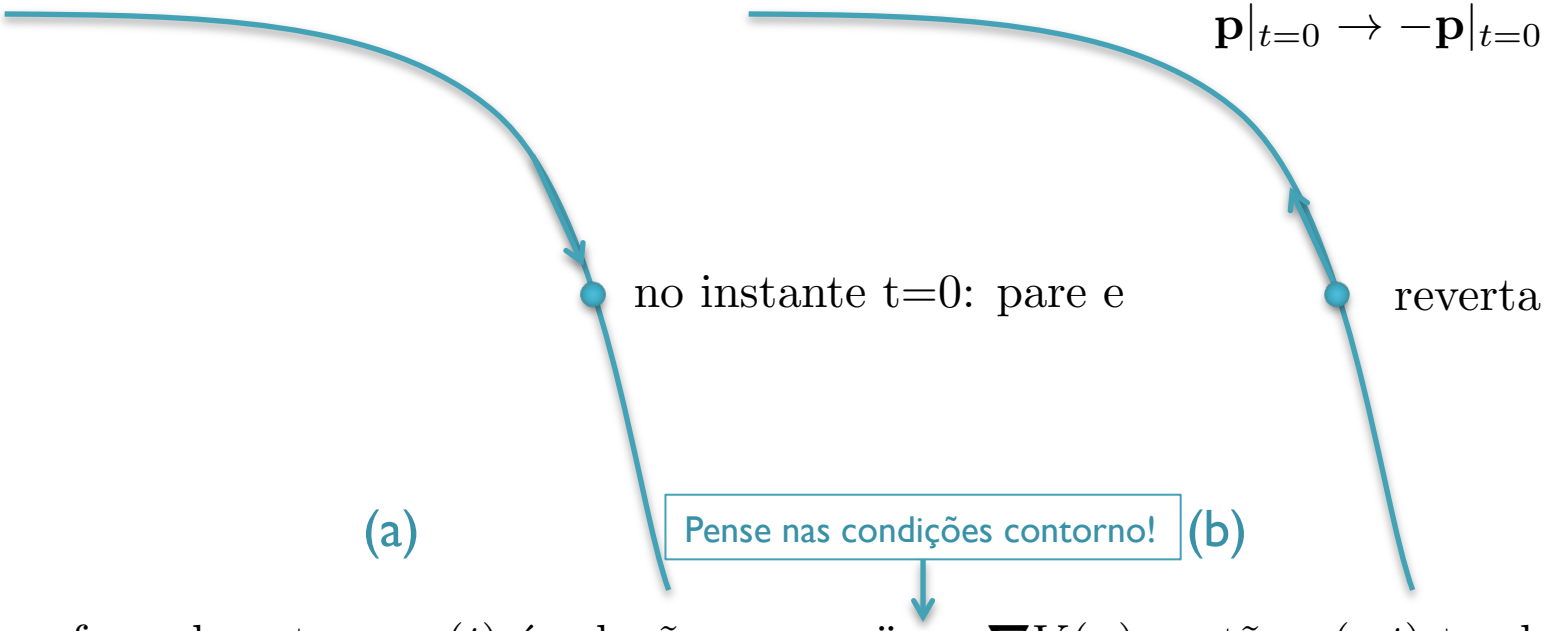
É possível mostrar que $\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle = 0$ a menos que $\epsilon_\alpha = -\epsilon_\beta$. Para ver isso, calculamos $\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\beta|\pi^{-1}}_{\langle\beta|\epsilon_\beta}\underbrace{\pi\mathbf{x}\pi^{-1}}_{-\mathbf{x}}\underbrace{\pi|\alpha\rangle}_{\epsilon_\alpha|\alpha\rangle} = \epsilon_\alpha\epsilon_\beta(-\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle) \rightarrow \epsilon_\alpha\epsilon_\beta = -1$

Na representação das coordenadas, temos: $\int \psi^*_\beta(\mathbf{x}')\mathbf{x}'\psi_\alpha(\mathbf{x}') = 0$ a menos que $\psi_\beta(\mathbf{x}')$ e $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ tenham paridades opostas. Uma consequência importante é que transições radiativas entre estados de mesma paridade são proibidas (fruto da expansão de multipolo do operador que causa a transição). Isso tudo pode ser generalizado: Operadores que são ímpares sob paridade, como $\mathbf{p}$ ou $\mathbf{S}.\mathbf{x}$ têm elementos de matriz não nulos, somente entre estados de paridades opostas. Os operadores pares conectam apenas estados de mesma paridade.

A Hamiltoniana responsável pela chamada interação fraca de partículas elementares não é invariante mediante paridade.

Simetria de Reversão Temporal

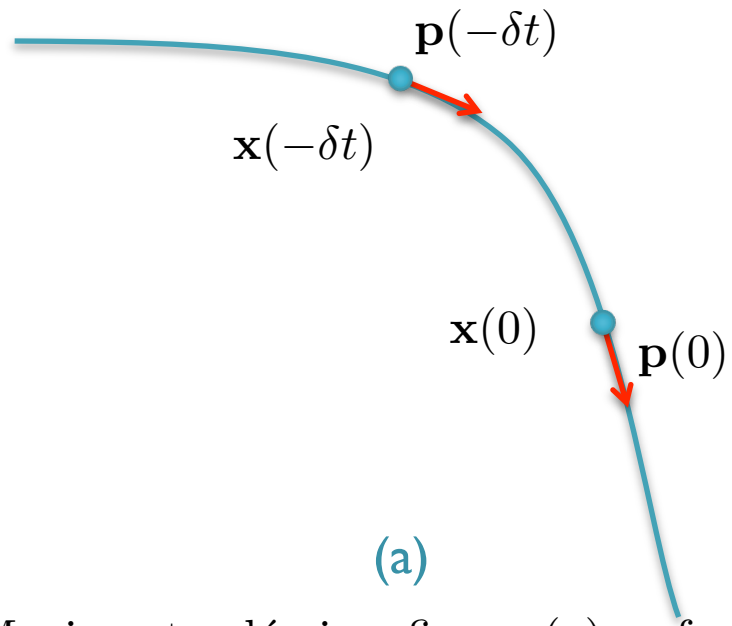
Classicamente, $\begin{cases} \text{(a) a partícula para no instante } t = 0 \\ \text{(b) reverte seu movimento.} \end{cases}$

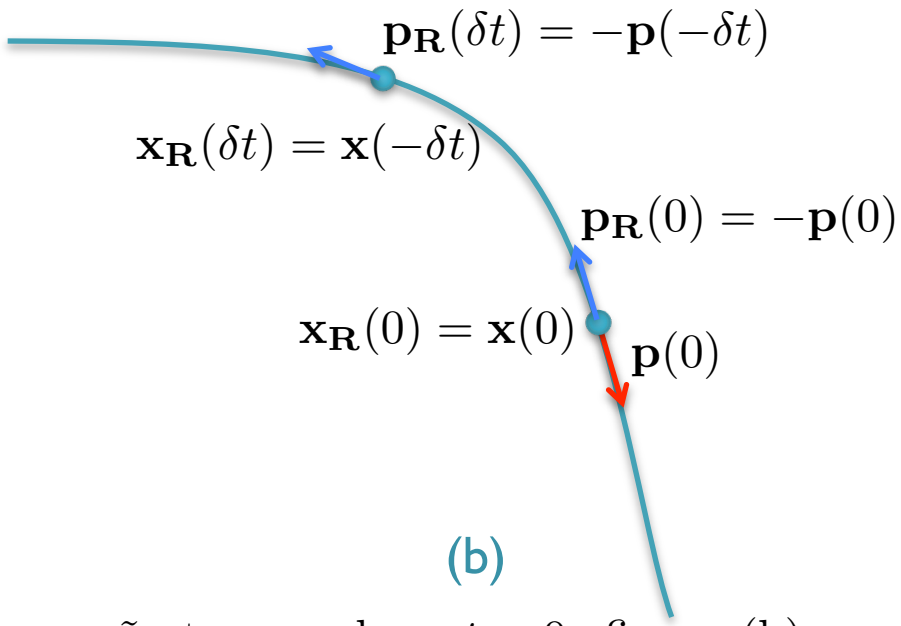


Mas, formalmente, se $\mathbf{x}(t)$ é solução para $m\ddot{\mathbf{x}} = -\boldsymbol{\nabla} V(\mathbf{x})$, então $\mathbf{x}(-t)$ também é uma solução possível do mesmo campo de forças derivado deste potencial. Obviamente não estamos tratando de forças dissipativas. Pense em um bloco deslizando em uma mesa horizontal com atrito. Por outro lado, jogue uma pedra para cima. É difícil distinguir a descida com o relógio andando para frente da subida com o relógio andando para trás.

Simetria de Reversão Temporal

Defina estado clássico pelo par $\big(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)\big)$, trajetória decorrente da solução da equação de Newton (ou de Lagrange ou de Hamilton-Jacobi) com condições de contorno do problema de uma partícula sujeita à um potencial.



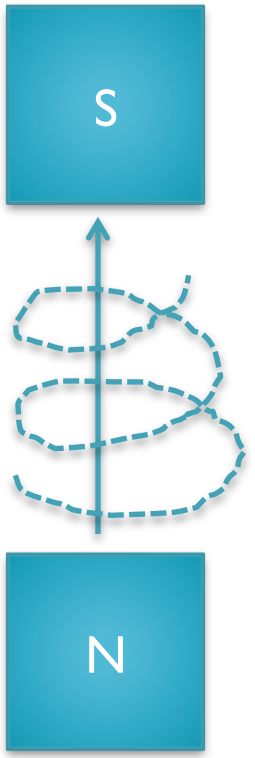


Movimento clássico, figura (a), sofre reversão temporal em $t = 0$, figura (b). Note que o "estado clássico" no instante $-\delta t$ descrito por $\big(\mathbf{x}(-\delta t); \mathbf{p}(-\delta t)\big)$ corresponde ao estado clássico, com reversão temporal no instante δt, isto é $\big(\mathbf{x_R}(\delta t); \mathbf{p_R}(\delta t)\big) \leftrightarrow \big(\mathbf{x}(-\delta t); -\mathbf{p}(-\delta t)\big)$ mesma posição, momento invertido. Esta é a simetria de reversão temporal. Note que $\mathbf{x}(t)$ e $\mathbf{x_R}(t)$ são soluções da equação de Newton com condições de contorno estabelecidas em $t = 0$.

Simetria de Reversão Temporal

No caso de uma carga sujeita à um campo magnético, seria possível distinguir entre $\mathbf{x_R}(t)$ e $\mathbf{x}(-t)$ se soubermos os pólos do imã que geram o campo magnético. Pela regra da mão direita, você diria qual movimento é o $\mathbf{x_R}(t)$, pois a força de Lorentz mudaria com a inversão da velocidade.

Se, entretanto, todos os movimentos mudassem, inclusive das partículas que geram os campos, a simetria é recuperada (acharíamos apenas que os símbolos S e N estariam trocados).



As equações de Maxwell $\begin{cases} \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{E} = 4\pi\rho \\ \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi\mathbf{j}}{c} \\ \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} \end{cases}$

e a força de Lorentz $\mathbf{F} = e[\mathbf{E} + (1/c)(\mathbf{v}\times\mathbf{B})]$ são

invariantes sob a troca $t \to -t$, se $\begin{cases} \mathbf{E} \to \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \to -\mathbf{B} \\ \rho \to \rho \\ \mathbf{j} \to -\mathbf{j} \\ \mathbf{v} \to -\mathbf{v} \end{cases}$

Simetria de Reversão Temporal na Mecânica Quântica

Vamos começar analisando o problema pela equação de onda de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \big(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V\big)\psi$$

$\psi(\mathbf{x}, -t)$ **não** é uma solução devido à derivada em primeira ordem no tempo. Entretanto, $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ é uma solução, pois o "i" compensa a troca de sinal devido à derivada. Nesta lógica se $\psi(\mathbf{x}, t) = u_n(\mathbf{x})e^{-iE_nt/\hbar}$ é solução da equação de Schrödinger, então $\psi^*(\mathbf{x}, -t) = u_n^*(\mathbf{x})e^{-iE_nt/\hbar}$ é solução da equação de Schrödinger com reversão temporal. Assim, concluímos que a reversão temporal tem alguma coisa a ver com conjugação complexa. Se $\psi = \langle\mathbf{x}|\alpha\rangle$ é a função de onda em $t = 0$, então a correspondente função da reversão temporal é $\psi^* = \langle\mathbf{x}|\alpha\rangle^*$. Veremos que isso vai valer para partículas sem spin.

Exemplo: onda livre

$$\psi(\mathbf{x}, t = 0) = e^{i\frac{\mathbf{p}.\mathbf{x}}{\hbar}} \quad \overset{\text{reversão temporal}}{\Longrightarrow} \quad \psi^*(\mathbf{x}, t = 0) = e^{-i\frac{\mathbf{p}.\mathbf{x}}{\hbar}}$$

Alguns comentários sobre operações de simetria

Antes de fazer um tratamento sistemático sobre o operador de reversão temporal, é importante discutir alguns aspectos gerais de operadores de simetria.

Considere a operação de simetria $\begin{cases} |\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle. \\ |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle. \end{cases}$ Poderíamos argumentar que é natural exigir $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$, pois foi o que exigimos para operações de rotação, translação e até paridade. Isso foi consequência do fato que o correspondente operador de simetria é unitário, isto é $\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$. Para o operador de reversão temporal, este argumento é demasiadamente restritivo. Basta impor $|\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle| = |\langle\beta|\alpha\rangle|$.

Note que ambas as condições $\begin{cases} \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle \\ \\ \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle \end{cases}$ satisfazem a condição acima. Veremos que esta condição menos restritiva para o operador de reversão temporal será mais adequada, (e parece fazer sentido, uma vez que a conjugação complexa está relacionada a esta operação de simetria). **Definiremos operador antiunitário** θ

$$\text{se} \begin{cases} |\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle \equiv \theta|\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle \equiv \theta|\beta\rangle \end{cases} \implies \begin{cases} \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle \equiv \langle\beta|\alpha\rangle^* \\ \theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) \equiv c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle \end{cases}$$

Simetria de Reversão Temporal na Mecânica Quântica

Note que o operador θ é antilinear e que é possível escrevê-lo como um produto $\theta = UK$, de um operador unitário U e um operador K, operador complexo conjugado, que tira o complexo conjugado de qualquer número aplicado ao ket que ele opera (de seu lado direito). Para K, temos:

$$Kc|\alpha\rangle = c^* K|\alpha\rangle$$

O que acontece com $|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$ quando aplicamos K?

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \quad \xrightarrow{K} \quad |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* K|a'\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* |a'\rangle$$

onde consideramos que $K|a'\rangle = |a'\rangle$, pois nada tem para K quando este atua sobre $|a'\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ em sua própria $\big(\{|a'\rangle\}\big)$, representação.

É preciso ter cuidado com isso, como veremos a seguir.

Simetria de Reversão Temporal na Mecânica Quântica

Poderíamos perguntar, se os autokets de S_y (spin 1/2) mudam mediante aplicação de K? A resposta é, se os autokets de S_z são usados como base, sim, os autokets de S_y mudam com a aplicação de K. Isto é:

$$K\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle\right) \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \mp \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle\right)$$

Entretanto, se os autokets de S_y são usados como base, eles não mudam com a ação de K. Assim, o efeito de K muda com a escolha da base. Consequentemente a forma de U em $\theta = UK$ também muda com a base.

Nota 1: $\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^* UK|\alpha\rangle + c_2^* UK|\beta\rangle$, ou seja $\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle$, conforme desejamos.

Nota 2: $|\alpha\rangle \xrightarrow{\theta} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^* UK|a'\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^* U|a'\rangle = \sum_{a'}\langle \alpha|a'\rangle U|a'\rangle$

e, assim $|\beta\rangle \xrightarrow{\theta} |\tilde{\beta}\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\beta\rangle^* U|a'\rangle \overset{CD}{\Longrightarrow} \langle\tilde{\beta}| = \sum_{a'}\langle a'|\beta\rangle\langle a'|U^\dagger$ e isso faz:

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a''}\sum_{a'}\langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger U|a'\rangle\langle\alpha|a'\rangle = \sum_{a'}\langle\alpha|a'\rangle\langle a'|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$$

Não precisa definir $\theta^\dagger$, basta sempre atuar θ em kets.

Operador de Reversão Temporal

Chamaremos de operador de reversão temporal, Θ, letra maiúscula para diferí-lo de θ, a forma geral estudada de operadores antiunitários. Assim,

$$|\alpha\rangle \rightarrow \Theta|\alpha\rangle$$

onde $\Theta|\alpha\rangle$ é o estado com reversão temporal. De forma mais apropriada, ele deveria ser chamado de estado com reversão de movimento. Se $|\alpha\rangle$ é um autoestado, $|\mathbf{p}'\rangle$, do operador momento, $\mathbf{p}$, esperamos que $\Theta|\alpha\rangle$ seja o $|-\mathbf{p}'\rangle$ a menos de uma possível fase global. De forma similar $\mathbf{J}$ pode ser visto sob a ação do operador de reversão temporal.

Agora, deduziremos a propriedade fundamental do operador de reversão temporal, por meio da evolução temporal de um estado revertido temporalmente. Para isso, considere um sistema físico representado por $|\alpha\rangle$ no instante $t = 0$. Em um instante infinitesimal do futuro, $t = \delta t$, o sistema é encontrado em $|\alpha, t_0 = 0; t = \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)|\alpha\rangle$, onde H é a Hamiltoniana que caracteriza a evolução temporal. O que mudaria se aplicássemos Θ em $|\alpha\rangle$ antes de evoluí-lo no tempo?

Simetria de Reversão Temporal na Mecânica Quântica

Primeiro, aplicamos Θ em $|\alpha\rangle$ e depois o evoluimos no tempo $\big(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\big)\Theta|\alpha\rangle$.

Se o movimento obedece simetria sob reversão temporal, esperamos que o ket acima seja o mesmo que $\Theta|\alpha, t_0 = 0; -\delta t\rangle$. Que significa: primeiro considere o ket estado em um instante anterior à $t = 0$, isto é em $t = -\delta t$. Aí, reverta $\mathbf{p}$ e $\mathbf{J}$. Matematicamente, estamos pedindo que:

$$\big(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\big)\Theta|\alpha\rangle = \Theta\big(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\big)|\alpha\rangle$$

O que implica em: $-iH\Theta|\rangle = \Theta iH|\rangle$, onde $|\rangle$ apenas simboliza que vale para todos os kets.

Como Θ é antiunitário, temos $-iH\Theta|\rangle = -i\Theta H|\rangle$ o que nos leva à expressão fundamental da Hamiltoniana sob ação da reversão temporal: $H\Theta = \Theta H$.

Porque Θ não pode ser unitário?

Se fosse { implicaria em: $-H\Theta = H\Theta$ e isso faz com que: $H\Theta|n\rangle = -\Theta H|n\rangle = -E_n\Theta|n\rangle \quad \rightarrow$ ou seja, $\Theta|n\rangle$ seria um autoket de H com autovalor $-E_n$. Isto não tem sentido nem para a partícula livre (mudança de sinal em $\mathbf{p}$ tudo bem, mas em $\mathbf{p}^2$?).

Simetria de Reversão Temporal na Mecânica Quântica

Vamos evitar de atuar operadores antiunitários em bras a partir da direita. Quando encontrarmos $\langle\beta|\Theta|\alpha\rangle$, entenderemos por $(\langle\beta|).(\Theta|\alpha\rangle)$, e nunca por $(\langle\beta|\Theta).(|\alpha\rangle)$. Os autores nem tentam definir $\langle\beta|\Theta$. Sem entrar em detalhes, isso é evitado porque a notação de Dirac foi inventada para lidar com operadores lineares e não com operadores antilineares. E ela fica confusa quando lidamos com os antilineares. Com isso em mente, vamos discutir o comportamento de operadores sob reversão temporal.

Suponha $\begin{cases} |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle \\ |\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle \end{cases}$ queremos provar que $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^\dagger \Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$,

onde A é um operador linear. Para provar isso, definia $|\gamma\rangle \equiv A^\dagger|\beta\rangle$

lembre que $\langle\gamma| \overset{CD}{\Leftrightarrow} \langle\beta|A = \langle\gamma|$.

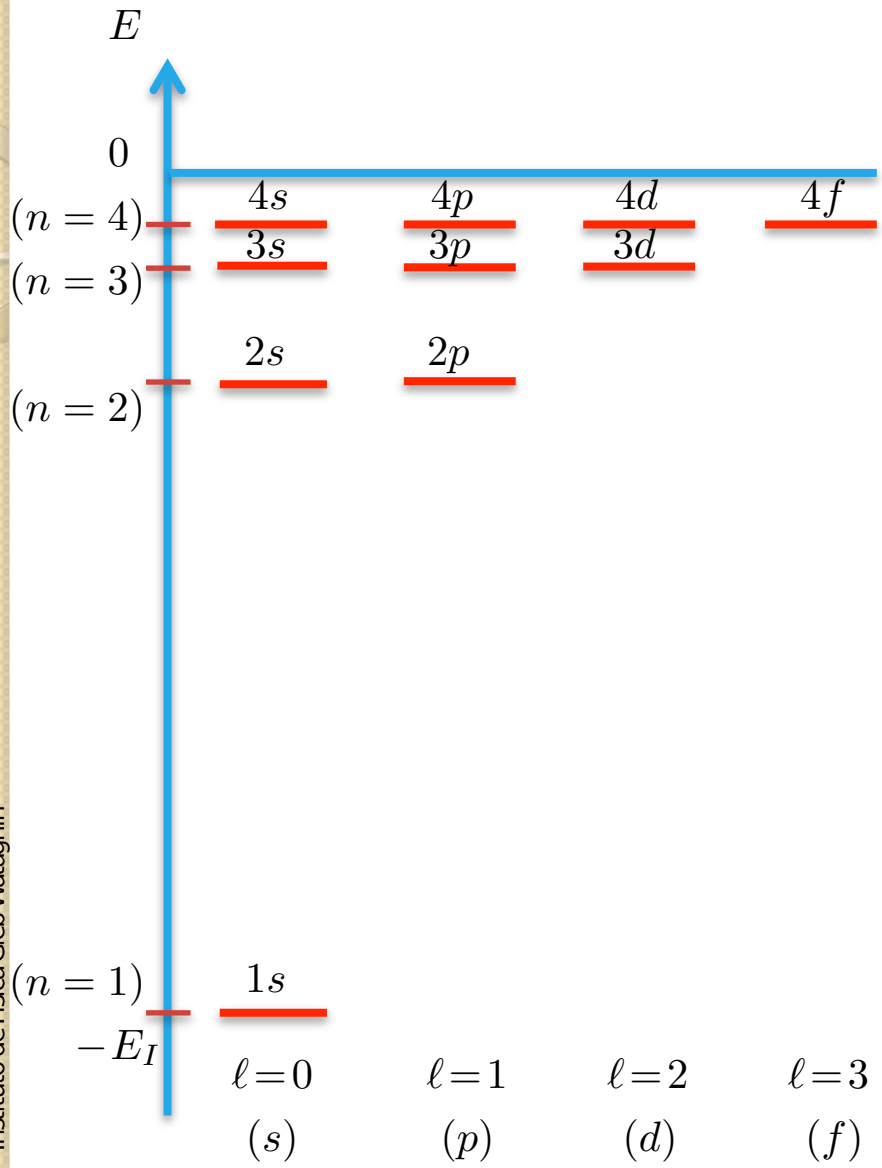
Assim, $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}\rangle}_{\substack{\text{definição de} \\ \text{operador antiunitário}}} = \langle\tilde{\alpha}|\Theta \underbrace{A^\dagger|\beta\rangle}_{|\gamma\rangle} = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^\dagger \underbrace{\Theta^{-1}\Theta}_{1}|\beta\rangle$

Com isso, temos: $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^\dagger\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$, pois $\Theta|\beta\rangle = |\tilde{\beta}\rangle$.

Para operadores Hermiteanos A temos: $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$.

Diremos que observáveis serão pares ou ímpares mediante reversão temporal se $\Theta A\Theta^{-1} = \pm A \;\; \therefore \langle\beta|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\beta}\rangle = \pm\langle\tilde{\beta}|A|\tilde{\alpha}\rangle^*$

Lousa: O Átomo de Hidrogênio. Níveis de energia



- A figura mostra

$$E_{k,\ell} = -\frac{E_I}{(k+\ell)^2} = -\frac{E_I}{n^2} = E_n$$

- Note degenerescências essenciais, H depende de ℓ e não de m.

- Note degenerescências acidentais,

$$k + \ell = k' + \ell' = n$$

- Para um dado ℓ existe um número infinito de energias (a figura mostra só até $n = 4$).

- Adotaremos que os três números quânticos (n, ℓ, m) especificam o autoket $|n, \ell, m\rangle$ simultâneo do CCOC, H, L^2, L_z.

Slide 1

Lousa

Slide 4

- Trocar H por E parece estranho, mas se justifica se todas as operações matemáticas dos operadores ocorrerem apenas no subespaço degenerado associado à energia E. Isso vale porque esses operadores, $\mathbf{M}$ e $\mathbf{L}$, comutam com H. Eles são bloco-diagonais no espaço de auto-estados de H.

- $$[M_i, M_j] = -i\hbar\epsilon_{ijk}\frac{2}{m}HL_k = -i\hbar\epsilon_{ijk}\frac{2}{m}EL_k = i\hbar\epsilon_{ijk}\underbrace{(-\frac{2E}{m})}_{\text{real positivo}}L_k$$

$$\therefore (-\frac{m}{2E})[M_i, M_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \Rightarrow [(-\frac{m}{2E})^{1/2}M_i, (-\frac{m}{2E})^{1/2}M_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}$$

e com $\mathbf{N} \equiv (-\frac{m}{2E})^{1/2}\mathbf{M}$ nos leva à $[N_i, N_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$.

Slide 6

- Note que $\begin{cases} \mathbf{I}^2 \text{ com autovalor } i(i+1)\hbar^2 \text{ tem degenerescência essencial } 2i+1 \\ \mathbf{K}^2 \text{ com autovalor } k(k+1)\hbar^2 \text{ tem degenerescência essencial } 2k+1 \end{cases}$

Como H comuta com ambos e $[I, K] = 0$ a degenerescência esperada é

$$(2i+1)(2k+1)$$

Slide 4

Sugestão do aluno Victor Antony para o caso 4x4

O que é necessário especificar para definir uma rotação geral? Que tal $\mathbf{n}$ e φ (3 números, onde $\mathbf{n}$ é definido por (β, α)). A melhor forma de representá-la é por meio de matrizes reais 3×3 (nove elementos). A condição de ortogonalidade, $R^T R = 1$ gera nove equações, mas só seis são linearmente independentes. Para

4 X 4 (16 elementos)

ver isso, observe que

$$\begin{cases} (RR^T)_{ik} = \sum_j R_{ij} R^T_{jk} = \sum_j \underbrace{R_{ij} R_{kj}}_{=' s} = \delta_{ik} \\ (RR^T)_{ki} = \sum_j R_{kj} R^T_{ji} = \sum_j \overbrace{R_{kj} R_{ij}} = \delta_{ki} \end{cases}$$

ou seja a equação do elemento ik é igual a equação do elemento ki de RR^T. Assim,

mesmas equações valem para o caso 4 X 4

temos seis equações independentes, com três parâmetros livres

$$\begin{cases} (1) \sum_j R^2_{1j} = 1; \ (2) \sum_j R^2_{2j} = 1; \ (3) \sum_j R^2_{3j} = 1; \\ (4) \sum_j R_{1j} R_{2j} = 0 \text{ igual à } \sum_j R_{2j} R_{1j} = 0; \\ (5) \sum_j R_{1j} R_{3j} = 0 \text{ igual à } \sum_j R_{3j} R_{1j} = 0; \\ (6) \sum_j R_{2j} R_{3j} = 0 \text{ igual à } \sum_j R_{3j} R_{2j} = 0. \end{cases}$$

aqui seriam 4 equações

aqui, seguindo a mesma Lógica seriam 6 equações

Estes três parâmetros que restaram dos nove, definem $\mathbf{n}$ *e* φ.

4+6=10 equações independentes. Restaram 6 dos 16 parâmetros: $\mathbf{n}_1, \phi_1$ e : $\mathbf{n}_2, \phi_2$