

Reversão temporal **A equação de Dirac: simetrias**

Para analisar isso, vamos recapitular o que fizemos no capítulo 4. Na ocasião, definimos $\Theta = UK$, onde U é um operador unitário e K é um operador que toma o complexo conjugado de qualquer número que apareça à sua direita. K não afeta kets, pode afetar combinação deles e $K^2 = 1$. Baseado nisso, definimos, um operador anti-unitário Θ que transforma um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ em “seu” ket com reversão temporal (ou, de forma mais apropriada, que represente $|\alpha\rangle$ com seu movimento revertido). Chamamos esse novo ket de $|\tilde{\alpha}\rangle$, tal que: $|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$

Na ocasião, concluímos que

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta \mathbf{p} \Theta^{-1} = -\mathbf{p} \\ \Theta \mathbf{x} \Theta^{-1} = \mathbf{x} \\ \Theta \mathbf{J} \Theta^{-1} = -\mathbf{J} \end{array} \right. \quad \text{e para } s = 1/2 \rightarrow \Theta = \underbrace{-i\sigma_y}_U K$$

Note que essa expressão de Θ obtida no capítulo 4 para spin 1/2 (aula 29 de FI001) permite concluir que $\Theta^2 = -i\sigma_y K (-i\sigma_y K) = \sigma_y \sigma_y^ K^2 = -1$.*

Vimos também que se H tem espectro não-degenerado e $[H, \Theta] = 0 \Rightarrow |n\rangle$ (que “anda” para frente no tempo) e $\Theta|n\rangle$ (que “anda” para trás no tempo) têm o mesmo autovalor de energia. Isso tudo acontece para equação de Schrödinger. O que esperamos da equação de Dirac?

A equação de Dirac: simetrias

Reversão temporal - continuação

Para analisar isso, retornemos a equação de Schrödinger com a Hamiltoniana

de Dirac:
$$i\partial_t\Psi(\mathbf{x}, t) = [-i\gamma^0\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + \gamma^0m]\Psi(\mathbf{x}, t)$$

Escreveremos nosso novo operador de reversão temporal, seguindo esquema semelhante da aula passada (com intuito de fazê-lo atuar em spinores 4×1)

como $\mathcal{T} = U_T K$, onde \mathcal{T} toma o lugar de Θ e U_T precisa ser encontrado.

Conforme fizemos antes, vamos inserir $\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}$ antes da função de onda em ambos os lados e multiplicar a equação toda por \mathcal{T} pela esquerda, para obter:

$$\mathcal{T}(i\partial_t)\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{x}, t) = \mathcal{T}[-i\gamma^0\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + \gamma^0m]\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{x}, t)$$

O lado esquerdo fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(i\partial_t)\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{x}, t) &= U_T K(i\partial_t)K U_T^{-1} U_T \Psi^*(\mathbf{x}, t) = -i\partial_t U_T \underbrace{K^2}_1 \underbrace{U_T^{-1} U_T}_1 \Psi^*(\mathbf{x}, t) \\ &= -i\partial_t U_T \Psi^*(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

E isso permite escrever $\mathcal{T}(i\partial_t)\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{x}, t) = i\partial_{-t}U_T\Psi^*(\mathbf{x}, t)$ (é o necessário para evolução temporal revertida). Para completar, precisamos fazer que o lado direito reflita a expectativa que $U_T\Psi^*(\mathbf{x}, t)$ satisfaça a equação de Dirac com

inversão temporal com o mesmo H . Para isso,
$$\begin{cases} \mathcal{T}(i\gamma^0\boldsymbol{\gamma})\mathcal{T}^{-1} = i\gamma^0\boldsymbol{\gamma} \\ \mathcal{T}(\gamma^0)\mathcal{T}^{-1} = \gamma^0 \end{cases}$$

A equação de Dirac: simetrias

Reversão temporal - continuação

Para simplificar a busca de U_T , multiplicamos a equação

$$\mathcal{T}(i\gamma^0\gamma)\mathcal{T}^{-1} = i\gamma^0\gamma$$

por \mathcal{T}^{-1} pela esquerda e por \mathcal{T} pela direita, para obter

$$i\gamma^0\gamma = \mathcal{T}^{-1}(i\gamma^0\gamma)\mathcal{T} = K^{-1}U_T^{-1}(i\gamma^0\gamma)U_T K$$

Multiplicando pela esquerda e pela direita por K , temos:

$$K(i\gamma^0\gamma)K = U_T^{-1}(i\gamma^0\gamma)U_T \Rightarrow -i\gamma^0(\gamma)^* = U_T^{-1}(i\gamma^0\gamma)U_T = U_T^{-1}i\gamma^0U_T U_T^{-1}\gamma U_T$$

$$\text{e assim, obter } -\gamma^0(\gamma)^* = \underbrace{U_T^{-1}\gamma^0U_T}_{\gamma^0} U_T^{-1}\gamma U_T = \gamma^0 U_T^{-1}\gamma U_T \Rightarrow U_T^{-1}\gamma U_T = -(\gamma)^*$$

Na representação escolhida, só γ^2 é imaginária. Assim, se pretendemos construir U_T com as matrizes γ , precisamos de uma combinação que não muda de sinal com a comutação de U_T com γ^0 e γ^2 , mas muda com γ^1 e γ^3 ,

$$\text{isto é } \begin{cases} \gamma^2 U_T = U_T \gamma^2 \text{ e } \gamma^0 U_T = U_T \gamma^0 \\ \gamma^1 U_T = -U_T \gamma^1 \text{ e } \gamma^3 U_T = -U_T \gamma^3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{é possível mostrar que} \\ U_T = \gamma^1 \gamma^3 \\ \text{dá conta do recado.} \end{cases}$$

O problema 8.13 da lista 6 sugere uma forma de provar isso.

A equação de Dirac: simetrias

CPT

Uma rápida olhada na combinação de operadores \mathcal{CPT} e sobre sua ação na

$$\text{função de onda de Dirac, } \Psi(\mathbf{x}, t), \text{ isto é de } \begin{cases} \mathcal{C}\Psi(\mathbf{x}, t) = i\gamma^2\Psi^*(\mathbf{x}, t) \\ \mathcal{P}\Psi(\mathbf{x}, t) = \gamma^0\Psi(-\mathbf{x}, t) \\ \mathcal{T}\Psi(\mathbf{x}, t) = \gamma^1\gamma^3\Psi^*(\mathbf{x}, t) \end{cases}$$

$$\mathcal{CPT}\Psi(\mathbf{x}, t) = i\gamma^2[\mathcal{PT}\Psi(\mathbf{x}, t)]^* = i\gamma^2\gamma^0[\mathcal{T}\Psi(-\mathbf{x}, t)]^* = i\gamma^2\gamma^0\gamma^1\gamma^3\Psi(-\mathbf{x}, t)$$

Assim, usando as regras de anti-comutação de $\gamma^\mu \rightarrow \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 0$, para $\mu \neq \nu$, podemos escrever

$$\mathcal{CPT}\Psi(\mathbf{x}, t) = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\Psi(-\mathbf{x}, t)$$

Essa combinação de matrizes tem um nome especial, γ^5 e pode ser calculada na representação reduzida 2×2 . Basta multiplicá-las para obter

$$\gamma^5 = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \mathcal{CPT}\Psi(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{bmatrix} \Psi(-\mathbf{x}, t) \Rightarrow \begin{cases} \text{O efeito do operador } \mathcal{CPT} \\ \text{sobre função de onda livre} \\ \text{de um elétron é convertê-la em} \\ \text{uma onda livre de um pósitron} \end{cases}$$

Isso cria uma correspondência muito forte entre partículas e anti-partículas, por exemplo, massa(pósitron)=massa(elétron).

A equação de Dirac: solução para o potencial central

Nosso objetivo é resolver o problema de autovalor $H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x})$, com

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m + V(r) \text{ e } \Psi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \text{ onde } \psi_1 \text{ e } \psi_2 \text{ são funções de onda}$$

de duas componentes. Já sabemos que $\Psi(\mathbf{x})$ precisa ser também autofunção de \mathbf{J}^2 , J_z e do operador paridade, $\beta\pi$.

Como o operador paridade ao quadrado é 1, os autovalores possíveis são ± 1 .

$$\text{Assim, temos } \beta\pi \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1(-\mathbf{x}) \\ -\psi_2(-\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \pm \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \text{ Isso nos deixa com}$$

$$\text{duas opções } \begin{cases} \psi_1(-\mathbf{x}) = +\psi_1(\mathbf{x}) \text{ e } \psi_2(-\mathbf{x}) = -\psi_2(\mathbf{x}) \\ \psi_1(-\mathbf{x}) = -\psi_1(\mathbf{x}) \text{ e } \psi_2(-\mathbf{x}) = +\psi_2(\mathbf{x}) \end{cases} \Rightarrow \text{Estas condições são}$$

$$\text{satisfeitas por } \begin{cases} \Psi_A(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} u_A(r)\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta, \phi) \\ -iv_A(r)\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \begin{cases} \text{par (ímpar)} \\ \text{para } j - 1/2 \\ \text{par (ímpar)} \end{cases} \\ \Psi_B(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} u_B(r)\mathcal{Y}_{j+1/2}^{jm}(\theta, \phi) \\ -iv_B(r)\mathcal{Y}_{j-1/2}^{jm}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \begin{cases} \text{ímpar (par)} \\ \text{para } j - 1/2 \\ \text{par (ímpar)} \end{cases} \end{cases}$$

A equação de Dirac: potencial central

Com essa proposta de função, estamos prontos para procurar por equações diferenciais (acopladas) em r para $u_{A(B)}$ e $v_{A(B)}$. Primeiro, vamos escrever a equação de Dirac, como duas equações acopladas para os spinores $\psi_1(\mathbf{x})$ e

$$\psi_2(\mathbf{x}) \text{ (já fizemos isso antes). Isto é } \begin{cases} [E - m - V(r)]\psi_1(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\psi_2(\mathbf{x}) = 0 \\ [E + m - V(r)]\psi_2(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\psi_1(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

$$\text{Das expressões (capítulo 3)} \begin{cases} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2 \end{cases} \Rightarrow \text{podemos}$$

$$\begin{aligned} \text{escrever } (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) &= \frac{|\mathbf{x}|^2}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x})^2}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \frac{1}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}) [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})] = \\ &= \frac{1}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}) [\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{p})] = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \left[\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{L}}{r} \right] \end{aligned}$$

Observações

- $\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} \cdot (-i\nabla) = -i\frac{\partial}{\partial r}$ na representação das coordenadas - esse operador atua somente na parte radial da função de onda.
- $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 \Rightarrow \begin{cases} \text{sabemos como isso} \\ \text{atua na parte angular.} \end{cases}$

Observações (cont.) A equação de Dirac: potencial central

- $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L})\mathcal{Y}_l^{jm} = [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]\mathcal{Y}_l^{jm} \equiv \kappa(j, l)\mathcal{Y}_l^{jm}$

com $\begin{cases} \kappa = -j - \frac{3}{2} = -(\lambda + 1) \text{ para } l = j + \frac{1}{2} \\ \kappa = j - \frac{1}{2} = +(\lambda - 1) \text{ para } l = j - \frac{1}{2} \end{cases} \rightarrow \text{onde } \lambda \equiv j + \frac{1}{2}.$

- Um pouco mais complicado é calcular o efeito do operador matricial

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \begin{bmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{bmatrix} \text{ sobre os spinores. Poderíamos obter o}$$

resultado da aplicação deste operador sobre \mathcal{Y}_l^{jm} a partir das expressões

obtidas no cap. 3 $\begin{cases} \mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2, m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \\ Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \end{cases}$

O livro texto sugere uma maneira mais fácil, considerando que o operador $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}$ deve se comportar como um pseudo-escalar sob rotações. Se soubermos o resultado para uma direção particular, saberemos para $\forall \hat{\mathbf{r}}$.

A equação de Dirac: potencial central

- Tomaremos a direção $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{z}}$, ou seja $\theta = 0$. Do capítulo 3, temos

$$Y_l^m(\theta = 0, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}$$

$$\text{e assim: } \mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2, m}(\theta = 0, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m-1/2}(\theta = 0, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m+1/2}(\theta = 0, \phi) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{bmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} \delta_{m, 1/2} \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} \delta_{m, -1/2} \end{bmatrix}$$

ou se tomarmos, $l = j \mp 1/2$, podemos escrever

$$\mathcal{Y}_{l=j\mp 1/2}^{j, m}(\theta = 0, \phi) = \sqrt{\frac{j+1/2}{4\pi}} \begin{bmatrix} \pm \delta_{m, 1/2} \\ \delta_{m, -1/2} \end{bmatrix} \text{ e desta forma}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{z}}) \mathcal{Y}_{l=j\mp 1/2}^{j, m}(\theta = 0, \phi) = -\sqrt{\frac{j+1/2}{4\pi}} \begin{bmatrix} \mp \delta_{m, 1/2} \\ \delta_{m, -1/2} \end{bmatrix} = -\mathcal{Y}_{l=j\pm 1/2}^{j, m}(\theta = 0, \phi)$$

$$\text{e } \therefore \boxed{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathcal{Y}_{l=j\pm 1/2}^{j, m}(\theta, \phi) = -\mathcal{Y}_{l=j\mp 1/2}^{j, m}(\theta, \phi)}$$

A equação de Dirac: potencial central

Observações (cont.)

- Note que como $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = 1$, temos

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathcal{Y}_{l=j\pm 1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \right] = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \left[-\mathcal{Y}_{l=j\mp 1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \right] = \mathcal{Y}_{l=j\pm 1/2}^{j,m}(\theta, \phi)$$

Vamos usar esses resultados em
$$\begin{cases} [E - m - V(r)]\psi_1(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\psi_2(\mathbf{x}) = 0 \\ [E + m - V(r)]\psi_2(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\psi_1(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

Do slide 5,
$$\begin{cases} \text{A: } \psi_1(\mathbf{x}) = u_A(r) \mathcal{Y}_{l=j-1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \text{ e } \psi_2(\mathbf{x}) = -iv_A(r) \mathcal{Y}_{l=j+1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \\ \text{B: } \psi_1(\mathbf{x}) = u_B(r) \mathcal{Y}_{l=j+1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \text{ e } \psi_2(\mathbf{x}) = -iv_B(r) \mathcal{Y}_{l=j-1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \end{cases}$$

Qual é o efeito de $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$ em $\psi_1(\mathbf{x})$ e $\psi_2(\mathbf{x})$? Vimos que

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \left[\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{L}}{r} \right] \text{ e que } \begin{cases} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} \text{ só atua na parte radial} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \text{ faz } \mathcal{Y}_{l=j\pm 1/2}^{j,m}(\theta, \phi) \text{ diagonal} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \text{ muda } l, \text{ mas não muda } jm \end{cases}$$

De fato, $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}}$ muda a parte angular de $\psi_2(\psi_1)$ para a parte angular de $\psi_1(\psi_2)$ e quando juntamos tudo as partes angulares se cancelam.

A equação de Dirac: potencial central

Assim, nosso novo problema é resolver equações acopladas radialmente, $u_A(r)$ e $v_A(r)$ para o caso A e $u_B(r)$ e $v_B(r)$ para o caso B . Isto é:

$$\text{Escolha A: } \begin{cases} [E - m - V(r)]u_A(r) - \left[\frac{d}{dr} + \frac{\lambda+1}{r}\right]v_A(r) = 0 \\ [E + m - V(r)]v_A(r) + \left[\frac{d}{dr} - \frac{\lambda-1}{r}\right]u_A(r) = 0 \end{cases}$$

$$\text{Escolha B: } \begin{cases} [E - m - V(r)]u_B(r) - \left[\frac{d}{dr} - \frac{\lambda-1}{r}\right]v_B(r) = 0 \\ [E + m - V(r)]v_B(r) + \left[\frac{d}{dr} + \frac{\lambda+1}{r}\right]u_B(r) = 0 \end{cases}$$

Note que o conjunto de baixo fica igual ao conjunto de cima com a troca $\lambda \rightarrow -\lambda$. Assim, podemos resolver apenas o conjunto de cima e ignorar os índices A e B .

Na próxima aula resolveremos um caso com solução analítica: o átomo de hidrogênio (de fato resolveremos átomos com 1 elétron e Z prótons)