§ Simetrias em Mecânica Clássica

Na formulação lagrangeana da Mecânica Clássica, o sistema é descrito pela função de Lagrange que depende das coordenadas generalizadas e as correspondentes velocidades

$$L = L(q, \dot{q})$$

As eqs. de movimento são as equações de Lagrange:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_j}$$

Temos uma lei de conservação para cada coordenada ignorável, isto é quando

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 .$$

Nesta situação, a função de Lagrange é <u>invariante</u> frente à transformação

$$q_k \rightarrow q_k + \delta q_k .$$

A grandeza conservada correspondente é o momento generalizado:

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) \Rightarrow p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = cte .$$

Na formulação Hamiltoniana, $\mathcal{H}$ é função das coordenadas e os momentos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p),$$

e as equações de Lagrange são substituídas pelas equações de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad -\dot{p}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}$$

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

Aqui temos a mesma situação. Se $\mathcal{H}$ não depender de q_i, isto é se $\mathcal{H}$ é invariante frente a transformação:

$$q_i \rightarrow q_i + \delta q_i,$$

então $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \dot{p}_i = 0 \Rightarrow p_i = cte.$

§ Interlúdio sobre Simetrias e Transformações Canônicas

§ TRANSFORMAÇÕES CANÔNICAS INFINITESIMAIS

Escrevemos uma transformação infinitesimal na forma:

$$Q_i = q_i + \delta q_i ,$$

$$P_i = p_i + \delta p_i$$

Aqui δq_i e δp_i não representam deslocamentos virtuais, mas mudanças infinitesimais nas coordenadas e nos momentos. A transformação canônica difere da identidade por uma grandeza infinitesimal. Se considerarmos a função geratriz de tipo $F_2 = F_2(q_i, P_i)$, a identidade é dada por

$$F_2^{id} = \sum_i q_i P_i .$$

Em efeito, temos:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i , \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i , \quad \forall i = 1 \dots s$$

$$K = \mathcal{H} + \underbrace{\frac{\partial F_2}{\partial t}}_{0} = \mathcal{H}$$

Assim escrevemos a função geratriz de uma transformação infinitesimal como:

$$F_2 = \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q, P) ,$$

onde ϵ é um parâmetro infinitesimal. As equações de transformação agora ficam

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \epsilon \dfrac{\partial G}{\partial q_i} \\[2ex] Q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \epsilon \dfrac{\partial G}{\partial P_i} \end{cases}$$

ou :

$$P_i - p_i = \delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}$$

$$Q_i - q_i = \delta q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} \simeq \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} ,$$

onde temos usado o fato que ϵ é um parâmetro infinitesimal, e temos escrito expressões até primeira ordem em ϵ

$$\frac{\partial}{\partial P_i} = \sum_j \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \frac{\partial}{\partial p_j} + \frac{\partial q_j}{\partial P_i} \frac{\partial}{\partial q_j} .$$

$$= \sum_j \left(\delta_{ij} + \epsilon \frac{\partial^2 G}{\partial P_i \partial q_j} \right) \frac{\partial}{\partial p_j} + (-\epsilon) \sum \frac{\partial^2 G}{\partial P_i \partial P_j}$$

$$\approx \frac{\partial}{\partial p_i} + o(\epsilon)$$

Resumo:

$$F_2 = \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q, P) \approx \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q, p)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \delta p_i &= -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \\ \delta q_i &= \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \end{aligned}}$$

Se fala nesta situação que $G(q,P)$ é o "gerador infinitesimal" da correspondente transformação canônica.

Uma aplicação interessante resulta quando $G(q,P)$ é o próprio Hamiltoniano do sistema e ϵ é um intervalo infinitesimal de tempo dt. Temos aqui:

$$\begin{cases} \delta q_i = dt\, \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i\, dt = dq_i\,, \\ \\ \delta p_i = -dt\, \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \dot{p}_i\, dt = dp_i\,. \end{cases}$$

Esta transformação canônica (de contato) descreve a evolução temporal do sistema, sendo o Hamiltoniano o gerador infinitesimal dela. A evolução temporal do sistema pode ser enxergada como uma seqüência de transformações infinitesimais de contato.

Consideremos agora uma grandeza $u(p,q)$. Queremos calcular a mudança de $u(p,q)$ induzida por uma transformação canônica. Por mudança neste contexto queremos indicar:

$$\delta u \equiv u(P,Q) - u(p,q)\,,$$

que para uma transformação infinitesimal é:

$$\begin{aligned} \delta u = u(p_i+\delta p_i, q_i+\delta q_i) - u(p_i, q_i) &= \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial p_i}\,\delta p_i + \frac{\partial u}{\partial q_i}\,\delta q_i \right) \\ &= \epsilon \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \\ &= \epsilon \left\{ u, G \right\} \end{aligned}$$

ou :

$$\delta u = \epsilon \{u, G\} .$$

Em particular, a mudança do Hamiltoniano perante uma transformação canônica é dada por:

$$\delta \mathcal{H} = \epsilon \{\mathcal{H}, G\} .$$

<u>SIMETRIA</u>:

Se o Hamiltoniano é invariante por uma transformação canônica $\Rightarrow \delta\mathcal{H} = 0$ ou

$$\{\mathcal{H}, G\} = 0,$$

isto é o parênteses de Poisson do Hamiltoniano com o gerador infinitesimal é nulo. Sabemos que isto também implica que G é uma constante do movimento

<u>Exemplo</u>. Construir o gerador infinitesimal de uma rotação.

Consideremos a seguinte rotação infinitesimal:

$$\begin{cases} X_i = x_i - y_i\,\delta\theta, \\ Y_i = y_i + x_i\,\delta\theta, \\ Z_i = z_i, \end{cases}$$

Com mudanças infinitesimais dadas por:

$$\delta x_i = \delta\theta \frac{\partial G}{\partial p_{ix}} = -\delta\theta\, y_i , \quad \delta y_i = \delta\theta \frac{\partial G}{\partial p_{iy}} = x_i\,\delta\theta$$

$$\delta z_i = 0$$

daí

$$\frac{\partial G}{\partial p_{ix}} = -y_i \quad , \quad \frac{\partial G}{\partial p_{iy}} = x_i \,.$$

Integrando temos:

$$G = \sum_i \left[(x_i p_{iy} - y_i p_{ix}) + F(x_i) + G(y_i) \right]$$

Observemos que o momentum transforma da mesma maneira frente a uma rotação. Logo:

$$\delta p_{ix} = -\delta\theta\, p_{iy} = -\delta\theta \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad , \quad \delta p_{iy} = \delta\theta\, p_{ix} = -\delta\theta \frac{\partial G}{\partial y_i}$$

Assim que a única possibilidade para G é

$$G = \sum_i \left(x_i p_{iy} - y_i p_{ix} \right) = \sum_i L_{iz}$$

"O momentum angular é o gerador infinitesimal das rotações".

A invariância do sistema frente à rotações se traduz por

$$\{ \mathcal{H}, G \} = \{ \mathcal{H}, L_z \} = 0 \,.$$

§ Simetrias em Mecânica Quântica

Tentamos escrever as simetrias como transformações unitárias

$$\mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^{\dagger} = \mathcal{U}^{\dagger} \cdot \mathcal{U} = 1 \ ,$$

que deixam invariante o Hamiltoniano:

$$\mathcal{U} \mathcal{H} \mathcal{U}^{\dagger} = \mathcal{U} \mathcal{H} \mathcal{U}^{-1} = \mathcal{H} \ .$$

Multiplicando por $\mathcal{U}$ pela direita, obtemos

$$\mathcal{U}\mathcal{H} = \mathcal{H}\mathcal{U} \ \Rightarrow \ [\mathcal{H}, \mathcal{U}] = 0 .$$

No caso de simetrias contínuas como as mencionadas em MClássica, o grupo de simetrias têm um gerador infinitesimal (tantos geradores como parâmetros do grupo). No caso de um parâmetro ε, a transformação infinitesimal em $\delta\varepsilon$ pode ser escrita como

$$\mathcal{U}(\delta\varepsilon) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varepsilon \, G$$

Def. Gerador infitesimal, G

$$G^{\dagger} = G \ , \quad [G, \mathcal{H}] = 0$$

Resulta que G é uma constante de movimento.

Exemplos:

i) grupo de translações espaciais, $\vec{G} = \vec{p}$;

ii) deslocamentos no tempo, $G = \mathcal{H}$ (translação no tempo;

iii) grupo de rotações, $\vec{G} = \vec{J}$.

Como interpretar uma constante de movimento?

I Versão de Heisenberg:

$$\frac{dG}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[G, \mathcal{H}\right] = 0, \quad G = cte.$$

II Versão de Schrödinger.

Sejam $|g, t_0\rangle$ os auto-kets de G para $t = t_0$

$$G|g, t_0\rangle = g|g, t_0\rangle$$

$|g, t_0\rangle$ evolui no tempo: $|g, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|g, t_0\rangle$,

onde $\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\mathcal{H}\right]$ é o operador de evolução temporal. Assim:

$$G|g,t_0;t\rangle = G\,\mathcal{U}(t,t_0)\,|g,t_0\rangle =$$
$$= \mathcal{U}(t,t_0)\Big[\underbrace{G|g,t_0\rangle}_{g|g,t_0\rangle}\Big] = g\,|g,t_0;t\rangle$$

Resultado:

$$G|g,t_0;t\rangle = g\,|g,t_0;t\rangle\ ,$$

ou seja os autovalores de G <u>não</u> dependem do tempo.

Degenerescência

Discutimos a degenerescência ligada à simetria. Consideramos um grupo de simetrias que deixam o Hamiltoniano invariante (chamado Grupo do Hamiltoniano). Seja $\mathcal{G} = \{\mathcal{U}\}$ este grupo. Temos:

$$[\mathcal{H}, \mathcal{U}] = 0\ , \quad \forall\, \mathcal{U} \in \mathcal{G}$$

Equivalentemente $\mathcal{U}\mathcal{H}\mathcal{U}^{\dagger} = \mathcal{H}$, onde todos os operadores são unitários. Porque unitários?

Sejam $|a\rangle$, $|b\rangle$ dois estados físicos:

$$|a'\rangle \equiv \mathcal{U}|a\rangle, \qquad |b'\rangle \equiv \mathcal{U}|b\rangle,$$

$$\Rightarrow \langle a'|b'\rangle = \langle a|\underbrace{\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{U}}_{1}|b\rangle = \langle a|b\rangle.$$

Portanto $\mathcal{U}$ deixa invariante as amplitudes $\langle a|b\rangle$, requerimento necessário para uma simetria.

Consideramos a base $\{|n\rangle\}$ de autoestados de $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H}\,|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Seja $\mathcal{U}|n\rangle$ o estado transformado por uma simetria:

$$\mathcal{H}(\mathcal{U}|n\rangle) = (\mathcal{H}\mathcal{U})|n\rangle = \mathcal{U}(\mathcal{H}|n\rangle) =$$

$$= E_n(\mathcal{U}|n\rangle).$$

Resulta que $\mathcal{U}|n\rangle$ também é auto-ket de $\mathcal{H}$ com o mesmo autovalor $\Rightarrow$ indica possível degenerescência.

Da nossa experiência com o grupo de rotações tiramos como hipótese que a degenerescência corresponde à dimensão dos espaços invariantes.

No caso do Hamiltoniano ser invariante por rotação, temos:

$$[\mathcal{D}(\hat{n},\theta), \mathcal{H}] = 0 ,$$

para todo operador de rotação. Evidentemente, temos que

$$[\vec{J},\mathcal{H}] = 0 \text{, e também } [J^2,\mathcal{H}] = 0.$$

Daí que os autokets do Hamiltoniano podem ser escritos como

$$|n; jm\rangle,$$

com

$$\mathcal{H}|n;jm\rangle = E(n,j)|n;jm\rangle,$$

$$J^2|n;jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|n;jm\rangle,$$

$$J_z|n;jm\rangle = \hbar m|n;jm\rangle.$$

A energia não depende do número quântico '$\underline{m}$', por causa da simetria de rotação e todos os estados

$$\mathcal{D}(\hat{n},\theta)|n,jm\rangle$$

tem a mesma energia. Os espaços invariantes são definidos por:

$$\mathcal{D}(\vec{n},\theta)|njm\rangle = \sum_{m'} |njm'\rangle \mathcal{D}_{m'm}(\hat{n},\theta)$$

com dim $2j+1$. Portanto a degenerêscência é de ordem $(2j+1)$.

Toda degenerescência devida à simetria é chamada ("Degenerescência Normal").

Uma degenerescência que não é Normal é chamada de "Acidental".

Perguntа: Existe a degenerescência acidental?

§ Simetrias Discretas

Até agora temos considerado apenas simetrias contínuas. Mas é claro que o Hamiltoniano poderá ter simetrias discretas (lembrar o caso do grupo Ortogonal).

Def. Operador Paridade, π

π está associado à inversão espacial. Podemos definir π por

$$\pi|\vec{x}'\rangle \equiv |-\vec{x}'\rangle$$

Qual é a ação de π sobre um ket estado arb. $|\alpha\rangle$?

$$\pi|\alpha\rangle = \int d^3x' \, \pi|\vec{x}'\rangle \underbrace{\langle\vec{x}'|\alpha\rangle}_{\psi_\alpha(\vec{x}')} =$$

$$= \int d^3x' \, |-\vec{x}'\rangle \, \psi_\alpha(\vec{x}')$$

Mudando de variável $\vec{x}' \longrightarrow -\vec{x}'$, com Jacobiano unitário:

$$\pi|\alpha\rangle = \int d^3x' \, |\vec{x}'\rangle \, \psi_\alpha(-\vec{x}') .$$

Projetando sobre a base $|\vec{x}'\rangle$:

$$\langle \vec{x}' | (\Pi | \alpha\rangle) = \psi_\alpha(-\vec{x}') \equiv \psi_{\pi\alpha}(\vec{x}')$$

Como transforma o operador $\vec{X}$?

$$\tilde{\vec{X}} \equiv \Pi^\dagger \vec{x} \Pi$$

Note que supondo Π ser uma simetria, assumimos que o operador é unitario. Pesquisar

$$\langle \alpha | \Pi^\dagger \vec{x} \Pi | \alpha \rangle = (\langle \alpha | \Pi^\dagger)(\vec{x} \Pi | \alpha \rangle)$$

Já encontramos que

$$\Pi | \alpha \rangle = \int d^3x' \, | -\vec{x}' \rangle \, \psi_\alpha(\vec{x}') \, ,$$

assim $$\langle \alpha | \Pi^\dagger = \int d^3x'' \langle -\vec{x}'' | \, \psi_\alpha^*(\vec{x}'') \, .$$

Agora

$$\vec{X} \Pi | \alpha \rangle = \int d^3x' (-\vec{x}') \, | -\vec{x}' \rangle \, \psi_\alpha(\vec{x}')$$

Finalmente:

$$\langle \alpha | \Pi^\dagger \vec{X} \Pi | \alpha \rangle = \int d^3x'' \int d^3x' \, \overbrace{\langle -\vec{x}'' | -\vec{x}' \rangle}^{\delta^{(3)}(\vec{x}'' - \vec{x}')} (-\vec{x}') \cdot$$

$$\cdot \, \psi_\alpha^*(\vec{x}'') \, \psi_\alpha(\vec{x}')$$

$$=$$

$$= \int d^3x' \, (-\vec{x}') \, \psi_a^*(\vec{x}') \, \psi_a(\vec{x}') = -\langle \alpha | \vec{x} | \alpha \rangle$$

Resultado:

$$\langle \alpha | \pi^\dagger \vec{x} \, \pi | \alpha \rangle = -\langle \alpha | \vec{x} | \alpha \rangle$$

Como o ket $|\alpha\rangle$ é arb., é razoável requerer

$$\pi^\dagger \vec{x} \, \pi = -\vec{x}$$

ou

$$\boxed{\vec{x} \, \pi = -\pi \, \vec{x}.}$$

Resultado:
A 'paridade' anti-comuta com o operador $\vec{x}$.

Obtemos: $\pi^2 |\vec{x}'\rangle = |\vec{x}'\rangle$,

identificando: $\pi^2 = 1$. (*)

Resulta que π não é apenas unitário, mas também hermiteano

$$\pi^\dagger = \pi = \pi^{-1}$$

Os autovalores (reais) de π satisfazem a mesma eq. (*):

$$\Pi|\pi'\rangle = \pi'|\pi'\rangle \ , \quad \text{com } (\pi')^2 = 1$$

ou $$\pi' = \pm 1 .$$

Como transforma o operador $\vec{p}$ (momentum)?

Seja $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ uma translação infinitesimal em $d\vec{x}'$. Temos:

$$\Pi\, \mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathcal{T}(-d\vec{x}')\, \Pi$$

ou
$$\Pi\left(1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{x}' \cdot \vec{p}\right) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} d\vec{x}' \cdot \vec{p}\right)\Pi$$

obtemos:
$$\Pi\left(-\frac{i}{\hbar} d\vec{x}' \cdot \vec{p}\right) = \frac{i}{\hbar} d\vec{x}' \cdot \vec{p}\, \Pi$$

Assumindo Π como operador linear, temos

$$\Pi\, \vec{p} = -\vec{p}\, \Pi .$$

Π anticomuta com $\vec{p}$.

Comportamento de Π sobre o momentum angular orbital:
$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

Os sinais se cancelam, dando:

$$\pi \vec{L} = \vec{L} \pi .$$

Um operador vetorial com esse comportamento é chamado de pseudo-vetor (ou vetor axial). Vetores axiais transformam como vetores convencionais sob rotações, mas tem comportamento diferente frente à inversão.

É natural supor que a mesma relação de comutação é satisfeita por $\vec{J}$ (incluindo spin):

$$\pi \vec{J} = \vec{J} \pi$$

"O spin não se importa com a inversão espacial"

Uma função de onda arb. $\psi_\alpha(\vec{x}')$ sempre pode gerar funções de paridade definida. Sabemos que

$$\psi_{\pi\alpha}(\vec{x}') = \psi_\alpha(-\vec{x}')$$

$$\psi_\alpha^{(+)}(\vec{x}') = \frac{1}{2}\left[\psi_\alpha(\vec{x}') + \psi_{\pi\alpha}(\vec{x}')\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\psi_\alpha(\vec{x}') + \psi_\alpha(-\vec{x})\right]$$

é par

$$\psi_\alpha^{(+)}(\vec{x}) = \frac{1}{2} \langle \vec{x}' | \left\{ |\alpha\rangle + \pi |\alpha\rangle \right\}$$

O ket par é:

$$|\alpha\rangle^{(+)} = \frac{1}{2}\left(|\alpha\rangle + \pi |\alpha\rangle\right).$$

De fato:

$$\pi |\alpha\rangle^{(+)} = (+) |\alpha\rangle^{(+)}$$

Similarmente, temos um ket de paridade negativa por:

$$|\alpha\rangle^{(-)} = \frac{1}{2}\left(|\alpha\rangle - \pi |\alpha\rangle\right)$$

$$\pi |\alpha\rangle^{(-)} = - |\alpha\rangle^{(-)}$$

Projetores.

Os projetores para as variedades par e ímpar são:

$$S \equiv \frac{1}{2}(1 + \pi)$$

$$A \equiv \frac{1}{2}(1 - \pi)$$

Verificamos:

$$A+S=1\,,$$
$$AS=SA=0\,,$$
$$S^2=S\,,$$
$$A^2=A\,,$$

que são propriedades gerais dos operadores de projeção.

Como $\vec{L}$ e π comuta, esperamos que os autoestados de $\vec{L}$ sejam também auto-estados de π.

Em efeito:

$$\langle \vec{x}'|\pi|lm\rangle = Y_l^m\left(-\frac{x'}{r},-\frac{y'}{r},-\frac{z'}{r}\right) =$$

$$= (-1)^l\, Y_l^m\left(+\frac{x'}{r},+\frac{y'}{r},+\frac{z'}{r}\right),$$

lembrando que $r^l Y_l^m\left(\frac{x'}{r},\frac{y'}{r}\,\frac{z'}{r}\right)$ é um polinômio homogêneo (harmônico) de grau 'l'.

Assim:

$$\pi|lm\rangle = (-1)^l|lm\rangle\,.$$