

4.1 Simetrias, Leis de Conservação e Degenerescências

Na mecânica clássica, simetrias podem ser exploradas no formalismo de Lagrange ou de Hamilton. Se a Lagrangeana NÃO muda quando fazemos $q_i \rightarrow q_i + \delta q_i$, i.e., o sistema apresenta simetria de translação na direção q_i , então

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \quad e$$

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \text{momento conservado.}$$

Da mesma forma, se H NÃO depende de q_i ,

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad e \quad p_i = \text{const}$$

Na mecânica quântica chamaremos um operador unitário S de um operador de simetria. No caso de S diferir da identidade por uma quantidade infinitesimal temos

$$S = 1 - \frac{i\epsilon G}{\hbar}$$

onde $G^\dagger = G$ é o gerador da simetria.

Se H é invariante pela simetria S , então

$$S^\dagger H S = H$$

$$[S, H] = 0 \quad \text{e} \quad [G, H] = 0.$$

Pela equação de Heisenberg $\frac{dG}{dt} = 0$ e G é uma constante do movimento.

Em termos de kets, se $|\psi(0)\rangle = |g'\rangle$ é um auto-estado de G com autovalor g' , então,

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|g'\rangle$$

é auto-estado de G com o mesmo autovalor:

$$G|\psi(t)\rangle = GU|g'\rangle = UG|g'\rangle = g'U|g'\rangle = g'|\psi(t)\rangle.$$

Finalmente notamos que se $[G, H] = 0$ então se $H|n\rangle = E_n|n\rangle$,

então $H(G|n\rangle) = G(H|n\rangle) = E_n(G|n\rangle)$. Se $|n\rangle$ e $G|n\rangle$

for distintos então E_n é degenerado. No caso específico da rotação, se H é invariante por rotações, então

$$[H, D(R)] = 0 \quad \text{ou} \quad D^\dagger(R) H D(R) = H,$$

para qualquer $D(R)$. Isso implica que

$$[H, J] = [H, J^2] = 0$$

e existem auto-estados comuns a H, J^2 e J_z , $|n, j, m\rangle$. Além disso, quaisquer estados da forma

$$D(R)|n, j, m\rangle = \sum_{m'} |n, j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(R)$$

tem a mesma energia. Para que isso seja possível para quaisquer rotações, os estados $|n, j, m\rangle$ devem ter a mesma energia para quaisquer valor de m , i.e., E_n NÃO pode depender de m .

Exemplo - Elétron em um átomo sujeito ao potencial $V(r) + f(r) \mathbb{L} \cdot \mathbb{S}$. Como

$$\mathbb{L} \cdot \mathbb{S} = \frac{1}{2} (\mathbb{J}^2 - \mathbb{L}^2 - \mathbb{S}^2)$$

comuta com \mathbb{J} e as partes radiais também, os estados $|n, j, m\rangle$ têm todas a mesma energia se n e j são fixos. A degenerescência então é, pelo menos, $2j+1$.

Exercício - Mostre que a energia de $|n, j, m\rangle$ não depende de m aplicando J_+ e J_- .

$$\begin{aligned} H J_+ |n, j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} H |n, j, m+1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} E(n, j, m+1) |n, j, m+1\rangle \\ &= J_+ H |n, j, m\rangle = E(n, j, m) \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |n, j, m+1\rangle \end{aligned}$$

Então $E(n, j, m+1) = E(n, j, m) \Rightarrow E$ não pode depender de m .

4.2 Simetrias Discretas: PARIDADE ou INVERSÃO ESPACIAL

O operador de paridade π é definido de forma a realizar a operação $x \rightarrow -x$ no contexto da mecânica quântica:

$$\boxed{\pi^\dagger x \pi = -x}$$

Impondo que π seja unitário isso é equivalente à

$$x \pi = -\pi x \rightarrow \{x, \pi\} = 0$$

Dizemos que x é ímpar pela paridade.

O efeito de π sobre $|x'\rangle$ é:

$$x \pi |x'\rangle = -\pi x |x'\rangle = -x' \pi |x'\rangle \Rightarrow \boxed{\pi |x'\rangle = |1-x'\rangle}$$

que é o desejado para o operador π .

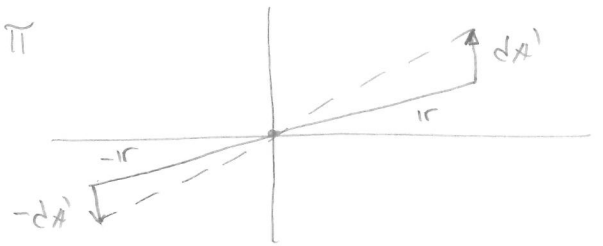
Como $\pi^2 = 1$ os auto-valores de π são apenas ± 1 .

Vamos agora estudar o efeito de π sobre os operadores P , L , S e $J = L + S$.

(A) Efeito sobre P - Lembrando do operador de translação $T(dx')$

vemos que $\pi T(dx') = T(-dx')\pi$

$$\Rightarrow \pi \left(1 - \frac{iP \cdot dx'}{\hbar}\right) = \left(1 + \frac{iP \cdot dx'}{\hbar}\right) \pi$$



$$-\pi (P \cdot dx') = (P \cdot dx') \pi$$

Para $dx' = dx' \hat{x}_i$ $-\pi P_i = P_i \pi \Rightarrow \{ \pi, P \} = 0$ ou $\boxed{\pi^\dagger P \pi = -P}$

e P f.b. é ímpar pela paridade.

(B) Efeito sobre $L = r \times p$. Tomando $L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k$

$$\pi^\dagger L_i \pi = \epsilon_{ijk} \underbrace{\pi^\dagger r_j \pi}_{-r_j} \underbrace{\pi^\dagger p_k \pi}_{-p_k} = \epsilon_{ijk} r_j p_k = L_i$$

e $[\pi, L] = 0 \Rightarrow \underline{L \text{ é par}}$

(C) Para J qualquer, pensar de relações, pensando da seguinte forma:
para matrizes ortogonais 3×3

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

$$e \quad R^{(\text{paridade})} R^{(\text{rotação})} = R^{(\text{rotação})} R^{(\text{paridade})} = -R^{(\text{rotação})}$$

Isso se traduz em

$$\pi \mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(R) \pi$$

$$\pi \left(1 - i \frac{\mathbb{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar} \right) = \left(1 - i \frac{\mathbb{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar} \right) \pi \Rightarrow [\pi, \mathbb{J}] = 0$$

e $\mathbb{J} = \text{par}$ em geral.

NOMENCLATURA

$\mathbb{X}, \mathbb{P}, \mathbb{J}$ SÃO vetores MAS

- $\left\{ \mathbb{X}, \mathbb{P} \text{ (ímpares sob } \pi) \text{ SÃO ditos vetores polares} \right.$
- e $\left\{ \mathbb{J}, \mathbb{L}, \mathbb{S} \text{ (pares sob } \pi) \text{ SÃO ditos pseudo-vetores ou vetores AXIAIS.} \right.$

$\vec{S} \cdot \vec{X}, \vec{S} \cdot \vec{L}, \vec{X} \cdot \vec{P}$ SÃO escalares MAS

- $\vec{S} \cdot \vec{L}$ e $\vec{X} \cdot \vec{P}$ SÃO pares sob π

- $\vec{S} \cdot \vec{X}$ é ímpar \Rightarrow pseudo-escalar

PROVA

$$\pi^\dagger \vec{S} \cdot \vec{X} \pi = \sum_i \underbrace{\pi^\dagger S_i \pi}_{S_i} \underbrace{\pi^\dagger X_i \pi}_{-X_i} = -\vec{S} \cdot \vec{X}$$

Seja $\Psi(x) = \langle x | \alpha \rangle$. Então

$$\langle x | \pi | \alpha \rangle = \langle -x | \alpha \rangle = \Psi(-x)$$

Se o estado $|\alpha\rangle$ for auto-estado de π então $\pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle$ e

$$\langle x | \pi | \alpha \rangle = \pm \Psi(x) = \Psi(-x). \text{ Assim:}$$

$$\begin{cases} \Psi(x) = \Psi(-x) \rightarrow \text{estado par} \\ \text{ou} \\ \Psi(x) = -\Psi(-x) \rightarrow \text{estado ímpar} \end{cases}$$

Exemplo - 1 - Auto-funções de P . Como $\{P, \pi\} = 0$ não há auto-funções de P com paridade definida. De fato $iP \cdot A/\hbar$ e não tem paridade.

$$\langle x | P \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Exemplo - 2 $H = P^2/2m$. É fácil ver que $[H, \pi] = 0$ e

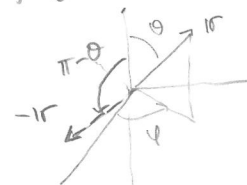
$$\begin{aligned} \langle x | E \rangle &= \cos(P \cdot x/\hbar) = \text{par} \\ \langle x | E' \rangle &= \sin(P \cdot x/\hbar) = \text{ímpar} \end{aligned} \quad \begin{cases} E = P^2/2m \\ \text{degenerada} \end{cases}$$

Exemplo - 3 Como $[L, \pi] = 0$ os auto-estados de L^2 e L_z devem ter paridade bem definida. Seja

$$\langle x | \alpha_{lm} \rangle = R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

FAZER $x \rightarrow -x$ é equivalente a fazer

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \varphi &\rightarrow \varphi + \pi \end{aligned}$$



$$Y_{em}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{em}(\theta, \varphi)$$

vemos que

$$\langle x' | \pi | \alpha l m \rangle = -(-1)^l \langle x' | \alpha l m \rangle \quad \text{em}$$

$$\pi | \alpha l m \rangle = (-1)^l | \alpha l m \rangle$$

TEOREMA - Se $[H, \pi] = 0$ e os auto-estados $|n\rangle$ de H são NÃO degenerados, então $|n\rangle$ tem paridade definida.

PROVA - 1 - H e π tem auto-estados comuns. Como os $|n\rangle$ são NÃO-degenerados, esses devem ser auto-estados de π também.

PROVA - 2 - Seja $|\psi\rangle = \frac{1}{2}(1 + \pi)|n\rangle$. Como $\pi^2 = 1$,

$$\pi|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad \text{Além disso } H|\psi\rangle = E_n|\psi\rangle.$$

Temos então duas possibilidades apenas para $|\psi\rangle$:

$$(A) \quad |\psi\rangle = |n\rangle \Rightarrow 2|n\rangle = (1 + \pi)|n\rangle \Rightarrow \pi|n\rangle = |n\rangle$$

$$(B) \quad |\psi\rangle = 0 \Rightarrow 0 = (1 + \pi)|n\rangle \Rightarrow \pi|n\rangle = -|n\rangle$$

Exemplo - O estado fundamental do oscilador harmônico 1-D é par (GAUSSIANA centrada em $x'=0$). Como a^+ é linear em x e p , a^+ é ímpar sob π e $a^+|0\rangle = \text{ímpar}$:

$$\langle x | a^+ | 0 \rangle = \psi_1(x)$$

$$\langle x | \pi a^+ | 0 \rangle = \langle -x | a^+ | 0 \rangle = \psi_1(-x)$$

$$= -\langle x | a^+ \underbrace{\pi | 0 \rangle}_{|0\rangle} = -\langle x | a^+ | 0 \rangle = -\psi_1(x).$$

Mostre que o espectro de uma partícula em um poço de potencial 1-D é sempre NÃO-degenerado.

Solução Se $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ tem a mesma energia E , então

$$\psi_1'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_1$$

$$\psi_2'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_2 \quad e$$

$$\frac{\psi_1''}{\psi_2''} = \frac{\psi_1}{\psi_2}, \quad \text{ou} \quad \psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0 = \frac{d}{dx} [\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2']$$

Integrando obtemos

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = \text{const.} \quad \text{Como}$$

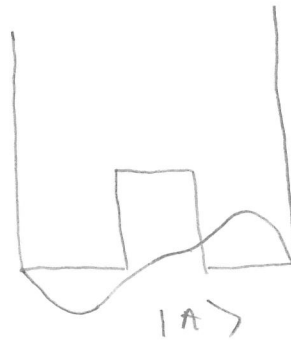
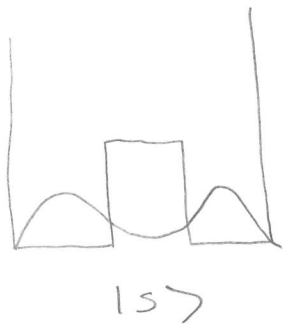
ψ_1 e $\psi_2 \rightarrow 0$ p/ $x \rightarrow \infty$, a constante deve ser nula. Assim,

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \rightarrow \frac{d}{dx} (\ln \psi_1) = \frac{d}{dx} (\ln \psi_2) \quad \text{ou}$$

$$\frac{d}{dx} [\ln (\psi_1 / \psi_2)] = 0 \quad e \quad \psi_1 / \psi_2 = \text{const.},$$

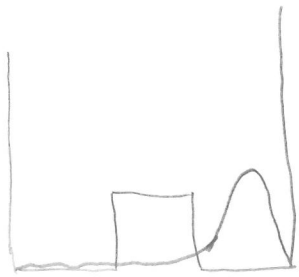
i. e., $\psi_2 = a \psi_1$.

O estado fundamental e o 1º estado excitado de um poço duplo simétrico são $|S\rangle = \text{simétrico}$ e $|A\rangle = \text{Antissimétrico}$:

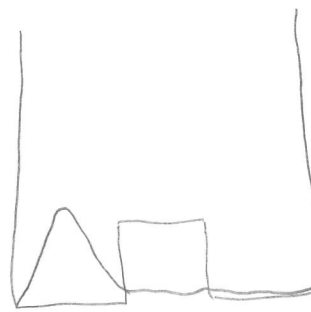


com $E_A > E_S$

As combinações abaixo quase localizam o estado à direita $|R\rangle$ ou à esquerda $|L\rangle$:



$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle + |A\rangle)$$



$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle - |A\rangle)$$

Veja que $|R\rangle$ e $|L\rangle$ não são auto-estados de H . Assim,

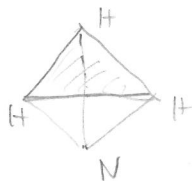
$$|R, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_S t/\hbar} \left[|S\rangle + e^{-i\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}} |A\rangle \right]$$

Definindo $\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar}$, vemos que

$$|R, t = \pi/\omega\rangle = e^{i\pi} |L\rangle, \quad \text{i.e., o estado tunelou para}$$

a esquerda no tempo $\tau = \frac{\pi \hbar}{\Delta E}$, se $\Delta E \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow \infty$.

A molécula de Amônia NH_3 apresenta esse tipo de situação:



$$\rightarrow \frac{\Delta E}{h} = 24 \text{ GHz}, \quad \lambda \sim 1 \text{ cm}$$

REGRAS DE SELEÇÃO

S_z $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são estados de paridade bem definidos, i.e.,

$$\pi |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle$$

$$\pi |\beta\rangle = E_\beta |\beta\rangle$$

$$E_\alpha, E_\beta = \pm 1$$

Então

$$\langle \alpha | X | \beta \rangle = 0 \quad \text{A NÃO SER QUE } E_\alpha = -E_\beta$$

PROVA

$$\langle \alpha | X | \beta \rangle = \underbrace{\langle \alpha | \pi \pi^\dagger}_{E_\alpha \langle \alpha |} X \underbrace{\pi \pi^\dagger | \beta \rangle}_{-X E_\beta | \beta \rangle} = -E_\alpha E_\beta \langle \alpha | X | \beta \rangle.$$

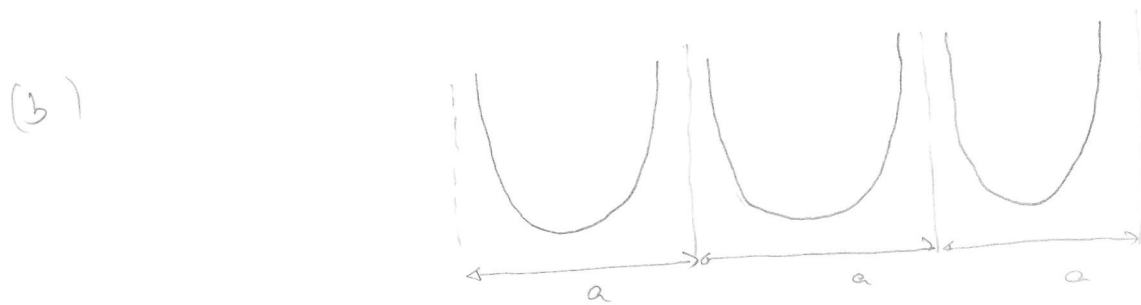
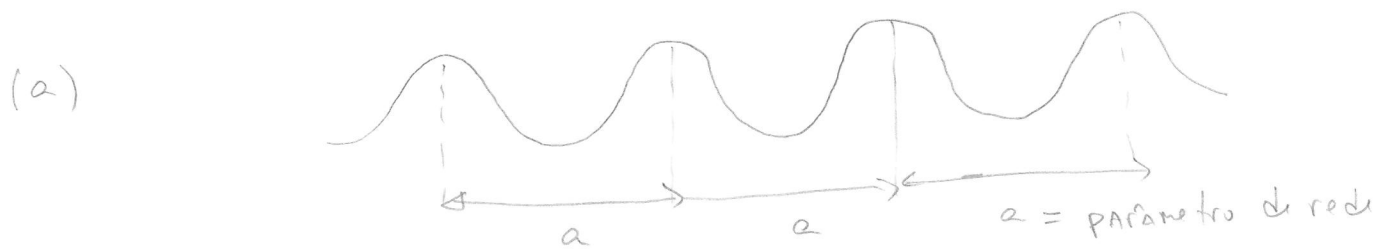
Em termos de funções de onda isso fica mais evidente:

$$\int \psi_\alpha^*(x) x \psi_\beta(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{se a integral for ímpar} \\ \neq 0 & \text{" " " par.} \end{cases}$$

Em geral, operadores ímpares só conectam estados de paridades opostas e operadores pares só conectam estados de mesma paridade. Essa "regra de seleção" é extremamente útil para cálculo de transições entre estados, particularmente em teoria de perturbação.

Considere um potencial periódico atrativo, como aquele que os íons em um metal exercem sobre um elétron (figura (a)). Se as barreiras de potencial entre os íons são altas podemos aproximar o potencial por uma sequência de poços desconexos (figura (b)).

A aproximação de tight-binding, que consideraremos em breve, assume que as barreiras são tão altas que basta considerar o acoplamento entre poços vizinhos.



Como $V(x) = V(x \pm a)$, podemos mostrar que $[H, T(a)]$:

$$T(a)^\dagger \times T(a) = x + a$$

$$T(a)^\dagger V(x) T(a) = V(x+a) = V(x) \quad \text{pois } \frac{a}{h}$$

$$T(a)^\dagger P T(a) = P \quad , \quad \text{pois } T(a) = e^{-i p a / \hbar}$$

Então

$$T^\dagger H T = H \quad e \quad H T = T H$$

Inicialmente vamos considerar o caso da figura (b). 160

Seja $|n\rangle$ um estado do n -ésimo poço com energia E_0 :

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle$$

$$\langle x'|n\rangle \neq 0 \text{ só no } n\text{-ésimo poço; } na < x' < (n+1)a$$

Como n vai de $-\infty$ a $+\infty$ temos degeneração infinita, pois podemos colocar esse estado em qualquer poço. No entanto

$|n\rangle$ NÃO é auto-estado de $T(a)$:

$$\langle x'|T(a)|n\rangle = \langle x'-a|n\rangle \neq 0 \text{ se } na < x'-a < (n+1)a$$
$$\text{ou } (n+1)a < x' < (n+2)a$$

$$\Rightarrow T(a)|n\rangle = |n+1\rangle$$

Vamos agora mostrar que a combinação linear

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle$$

é auto-estado simultânea de H e $T(a)$. Obviamente $H|\theta\rangle = E_0|\theta\rangle$.

$$T(a)|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(n-1)\theta} |n\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle$$

e temos uma família a um parâmetro de auto-estados comuns, com $-\pi < \theta < \pi$.

Vamos então voltar ao caso da figura (a) na

aproximação de tight-binding. Agora os estados localizados

$|n\rangle$ VAZAM para os poços vizinhos de cada lado, como $|R\rangle$

e $|L\rangle$ no caso do poço duplo, pag. 157. Nessa base a matriz de H não será diagonal. Vamos supor que

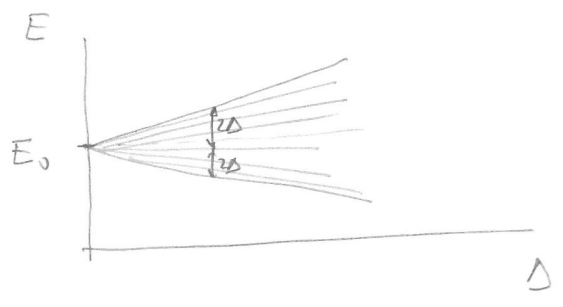
$$\langle n \pm 1 | H | n \rangle = -\Delta$$

e que os outros elementos, como $\langle n+2 | H | n \rangle$ ou $\langle n+1 | H | n-1 \rangle$ sejam ≈ 0 .
Supondo ainda que $\langle n | n' \rangle \approx \delta_{nn'}$ então

$$H | n \rangle = E_0 | n \rangle - \Delta | n+1 \rangle - \Delta | n-1 \rangle$$

Agora, o estado $|\theta\rangle$, que é auto-estado de $\tau(\theta)$, continua auto-estado de H , mas com o seguinte auto-valor:

$$\begin{aligned}
H |\theta\rangle &= H \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle = E_0 |\theta\rangle - \Delta \sum e^{i(n+1)\theta} - \Delta \sum e^{i(n-1)\theta} \\
&= [E_0 - \Delta e^{-i\theta} - \Delta e^{i\theta}] |\theta\rangle \\
&= \underbrace{(E_0 - 2\Delta \cos\theta)}_{\text{varia de } E_0 - 2\Delta \text{ até } E_0 + 2\Delta} |\theta\rangle \equiv \text{BANDA CONTÍNUA}
\end{aligned}$$



Vamos olhar para a função $\langle x' | \theta \rangle$. Tudo que usaremos

Agora é que $\tau(\theta) |\theta\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle x' | \tau(\theta) |\theta\rangle &= \langle x'-a | \theta \rangle \\
&= e^{-i\theta} \langle x' | \theta \rangle
\end{aligned}$$

Escrevendo

$$\langle x' | \theta \rangle = e^{i\kappa x'} U_{\kappa}(x')$$

obtemos

$$e^{i\kappa(x'-a)} U_{\kappa}(x'-a) = e^{-i\theta} e^{i\kappa x'} U_{\kappa}(x')$$

que é solução se

$$\kappa a = \theta \quad \text{e} \quad U_{\kappa}(x'-a) = U_{\kappa}(x').$$

Esse resultado é conhecido como TEOREMA DE BLOCH: As auto-funções simultâneas de $\tau(x)$ e H , para $[H, \tau(x)] = 0$, podem ser escritas como o produto de uma onda plana por um função periódica de x' . Note que

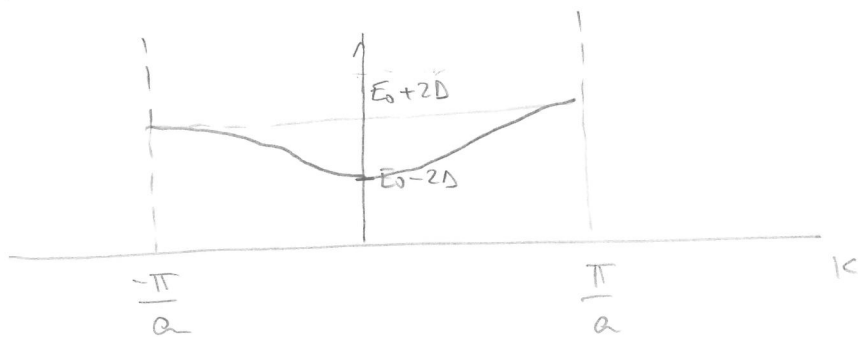
$$|\langle x' | \theta \rangle|^2 = |\langle x'+a | \theta \rangle|^2$$

como esperado.

No caso tight-binding

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos ka \quad \text{onde} \quad \frac{-\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a},$$

conhecida como 1ª zona de Brillouin.



onde usamos o parâmetro k em vez de usar θ , com

$$|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\kappa a} |n\rangle$$

AS ZONAS DE BRILLOVIN

A função de onda $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$ difere de $\psi_k(x+a)$

apenas pela fase e^{ika} . Conforme k varia de $-\pi/a$ a $+\pi/a$ (ou de 0 a k_0) essa fase realiza um ciclo completo. Qualquer valor de k fora desse intervalo representa uma diferença de fase equivalente a um k entre $[-\pi/a, +\pi/a]$, chamado de 1ª zona de Brillouin.

A EQUAÇÃO de Schrödinger para $u_k(x)$.

A diferença entre ψ_k e u_k é uma fase e pode ser tratada como uma transformação de Gauge. Se ψ_k satisfaz

$$\frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 \psi + V\psi = E\psi$$

e $u = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(x)} \psi$ $A \rightarrow \tilde{A} = A + \nabla \Lambda$:

$$\frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} (A + \nabla \Lambda) \right)^2 u + Vu = Eu$$

Tomando $A=0$, $\frac{e}{c} \Lambda = \varepsilon$ Logo, em 1-D:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi$$

$$u = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \psi = e^{-ikx} \psi$$

$$\Rightarrow \Lambda = -\hbar k x$$

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar k \right) u + Vu = Eu$$

ou

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} + ik \right)^2 u + Vu = Eu}$$

Exemplo - Vamos supor que $V(x) = 0$ mas com $\psi_k(x) = \psi_k(x+L)$. Pela forma da equação podemos supor que

$$\psi_k(x) = e^{i\alpha x}$$

Substituindo na equação vemos que

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k+\alpha)^2 = E$$

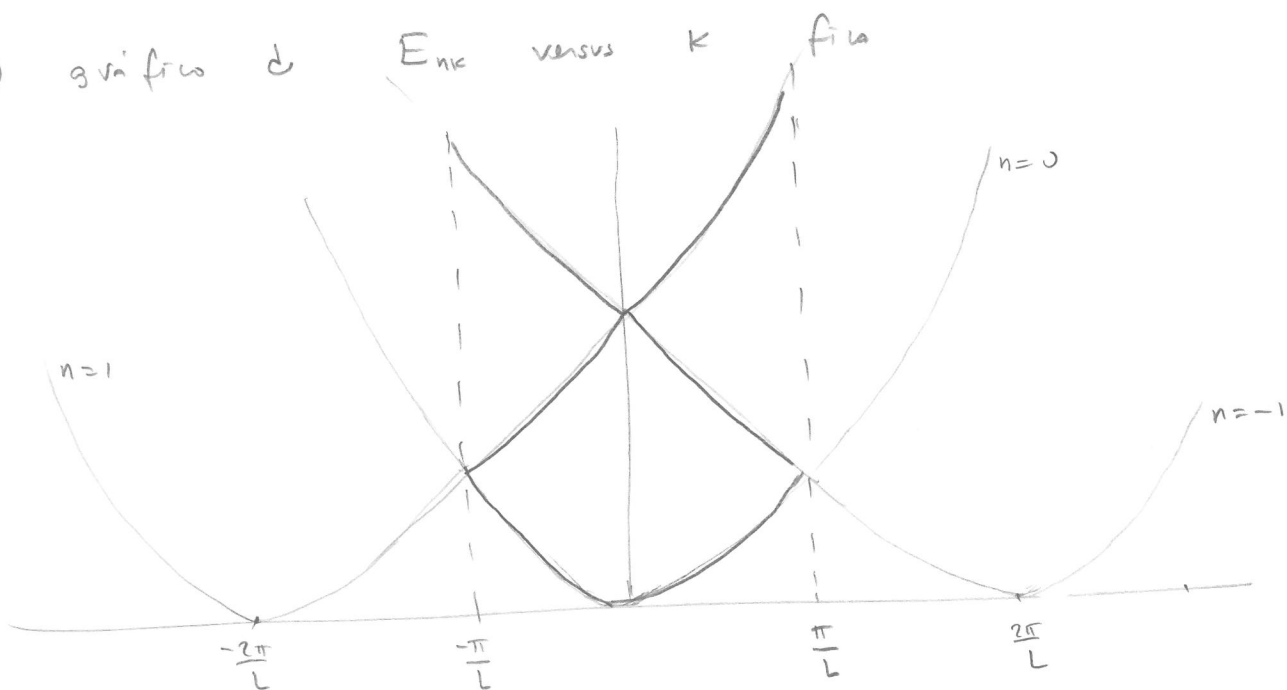
e que $\alpha = \frac{2n\pi}{L}$ para que $\psi_k(x+L) = \psi_k(x)$.

Então

$$E_{nk} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + \frac{2n\pi}{L} \right)^2$$

O índice n conta as bandas, enquanto $-\pi/L \leq k \leq \pi/L$.

O gráfico de E_{nk} versus k fica

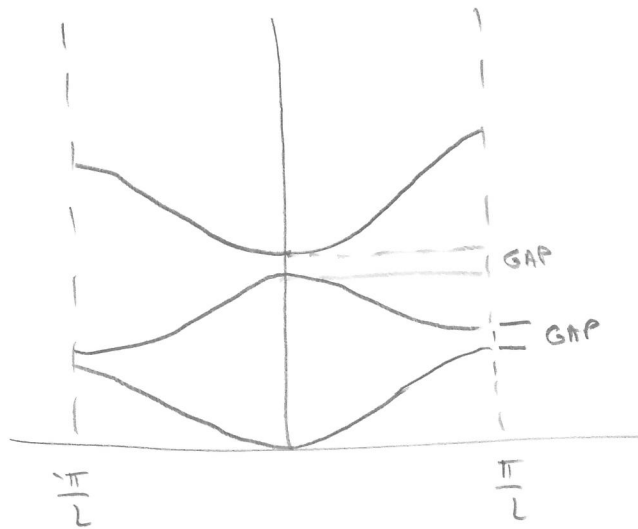


1ª zona de
Brillouin

$$\psi_{nk}(x) = e^{i(k + \frac{2n\pi}{L})x}$$

Se $V(x)$ é diferente de zero APARECEM GAPS

entre as bandas:

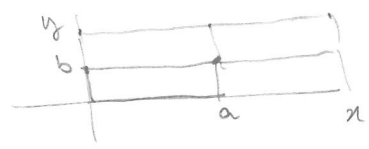


MAIS DIMENSÕES

Nesse caso tomamos $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

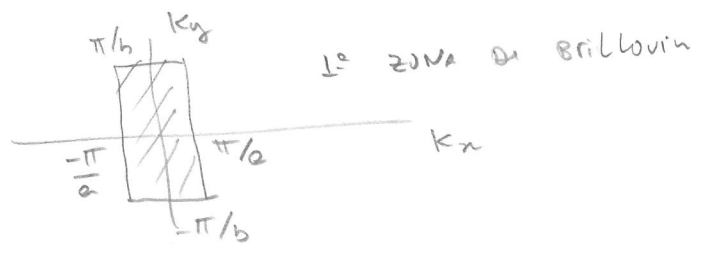
com $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ onde \mathbf{R} é um vetor da rede periódica.

Exemplo 1 - Rede retangular 2-D



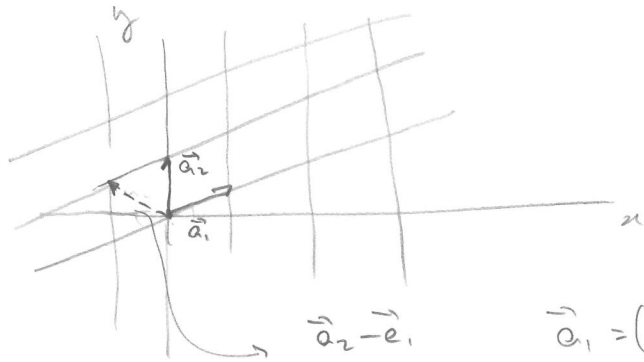
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + a\hat{x}) = e^{ik_x a} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow -\pi \leq k_x a \leq \pi$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + b\hat{y}) = e^{ik_y b} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow -\pi \leq k_y b \leq \pi$$



Exemple 2

Re de oblique



$$-\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a}$$

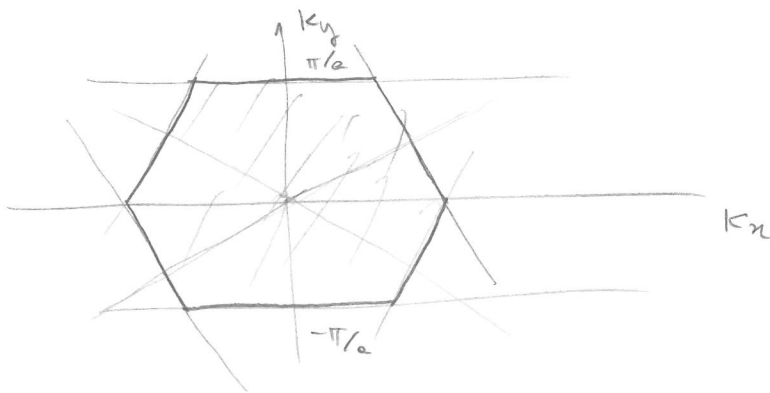
$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x \cos \theta + k_y \sin \theta \leq \frac{\pi}{a}$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq -k_x \cos \theta + (1 - \sin \theta) k_y \leq \frac{\pi}{a}$$

$$\vec{a}_1 = (\cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y}) a$$

$$\vec{a}_2 = a \hat{y}$$

$$\vec{a}_2 - \vec{a}_1 = (-\cos \theta, 1 - \sin \theta) a$$

Exemple 3 Re de cubica simple

$$\mathbb{R} = a(n, l, m)$$

1^o zona de Brillouin = cubo de lado $-\frac{\pi}{a} \rightarrow +\frac{\pi}{a}$

No fundo da banda, próximo de $E_0 - 2\Delta$, podemos

Aproximam

$$E(k) \approx (E_0 - 2\Delta) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

onde $m^* = \frac{1}{2\Delta a^2}$ faz o papel de uma massa efetiva.

Se houverem vários elétrons, como em um metal, eles ocupam os níveis disponíveis um a um devido ao princípio de exclusão de Pauli. Se o número de elétrons for maior do que o número de níveis, alguns terão que populam outra banda, que o número de níveis, alguns terão que populam outra banda, mais excitada. Se essa for uma banda de condução (com energias acima do topo das barreiras na figura 1a) o material será condutor.

4.4 A simetria de REVERSÃO TEMPORAL

Simetria por reversão temporal se refere ao fato de NÃO podermos distinguir o movimento real daquele "passado ao contrário", como em um filme de cinema. Sistemas sob a ação de atrito são obviamente NÃO reversíveis.

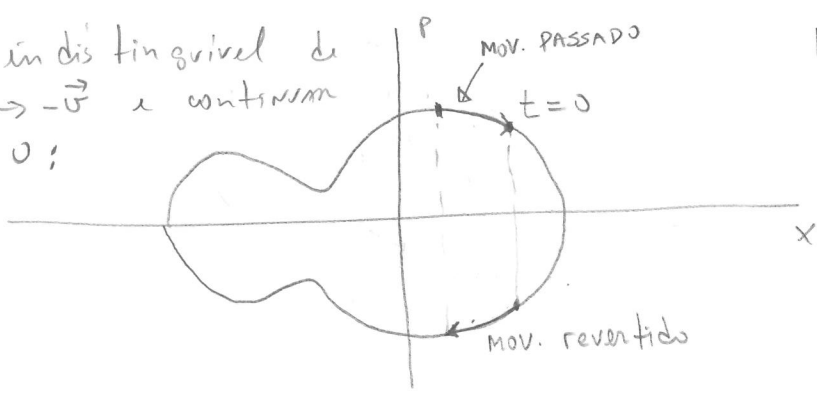
O movimento de uma partícula em um campo de forças conservativas é reversível. Isso implica que se $\psi(t)$ é solução de

$$m \frac{d^2\psi}{dt^2} = F(\psi(t))$$

então $\psi(t) = \psi(-t)$ t.b. é solução. Do fato, chamando $\tau = -t$ temos

$$m \frac{d^2\psi(-t)}{d\tau^2} = F(\psi(-t)) \rightarrow m \frac{d^2\psi}{d\tau^2} = F(\psi(\tau))$$

Note que para revertermos o movimento temos que trocar $t \rightarrow -t$ (PASSAR O FILME PARA TRÁZ), o que também faz com que $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$. Isso deve ser indistinguível de trocar $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$ e continuar com $t > 0$;



$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

(NOTE A SIMETRIA $P \rightarrow -P$)

Outro exemplo ocorre com o movimento de uma carga em campos \vec{E} e \vec{B} . As equações

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi\vec{j}}{c}, \quad \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad \vec{F} = q[\vec{E} + \frac{v}{c} \times \vec{B}]$$

ficam "INVARIANTES" pela transformação $t \rightarrow -t, \vec{B} \rightarrow -\vec{B}, \vec{j} \rightarrow -\vec{j}, v \rightarrow -v$ e $\vec{E} \rightarrow \vec{E}, \rho \rightarrow \rho$. A ideia de reverter \vec{B} e \vec{j} é que as cargas que produzem \vec{B} e \vec{j} devem também ser revertidas quando "passamos o filme ao contrário".

Veja agora a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x,t)$$

Trocar $t \rightarrow -t$ muda a equação. No entanto, se $\psi(x,t)$ é solução, então $\psi^*(x,-t)$ também é: tome a eq. complexo-conjugada

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi^*(x,t)$$

e define $\tau = -t$

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,-\tau)}{\partial \tau} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi^*(x,-\tau)$$

Compare a figura simétrica obtida com

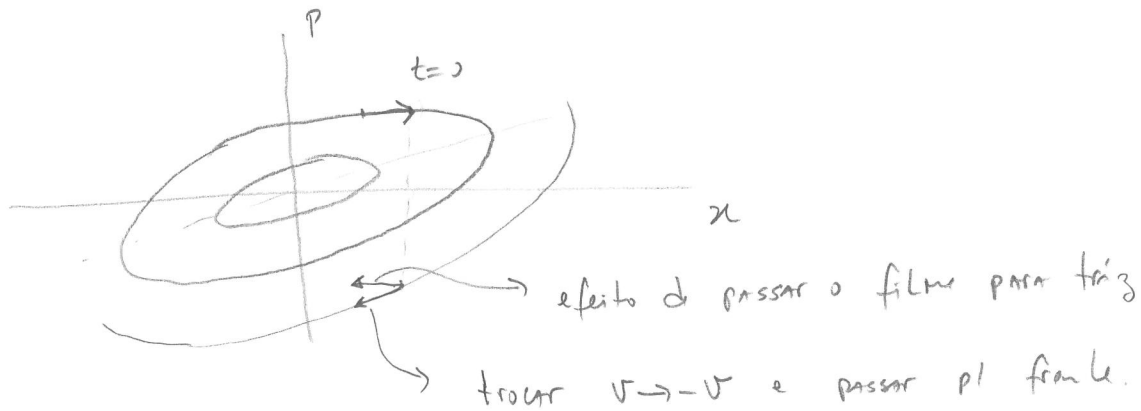
$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

da página anterior com, por exemplo, aquela que obtemos de

$$H = \frac{1}{2m} (p - A(x))^2 + V(x)$$

que NÃO tem a simetria $p \rightarrow -p$: ϵ $A(x) = \alpha x$, $\alpha \ll 1$, 0

efeito é



Outra maneira de ver é substituindo

$$\Psi(x,t) = U_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad \text{ou} \quad \Psi^*(x,-t) = U_n^*(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\Downarrow \qquad \qquad \qquad \Downarrow$$

$$H U_n = E_n U_n \qquad \qquad \qquad H U_n^* = E_n U_n^*$$

e temos a mesma equação independente do tempo e funções estacionárias.
Vemos que reversão temporal em mecânica quântica está associada à conjugação complexa.

TRANSFORMAÇÕES ANTI-UNITÁRIAS - transformações unitárias, como translação

e rotação, preservam o produto escalar:

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle \quad \text{e} \quad |\beta\rangle \rightarrow |\tilde{\beta}\rangle$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle \rightarrow \langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle$$

DEFINIÇÃO A transformação θ é ANTI-UNITÁRIA se dado

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \theta |\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \theta |\beta\rangle \quad \text{então}$$

$$(a) \quad \langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \beta \rangle$$

$$(b) \quad \theta (c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle) = c_1^* \theta |\alpha\rangle + c_2^* \theta |\beta\rangle \quad (\text{ANTI-LINEAR})$$

TODA transformação unitária pode ser escrita como

$$\theta = UK$$

onde

$U =$ unitário

$K =$ toma o complexo conjugado de \forall coeficiente multiplicando todos à sua direita, i.e.,

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

1) Se $\{|a_n\rangle\}$ é escolhida como base

$$|\alpha\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \alpha \rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = K|\alpha\rangle = \sum_n \langle \alpha | a_n \rangle K |a_n\rangle \\ = \sum_n \langle \alpha | a_n \rangle |a_n\rangle$$

pois $|a_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}$ e K não tem parcel algum sobre $|a_n\rangle$.

2) Seja a base $|+\rangle, |-\rangle$ de S_z e $|\alpha\rangle = c_1|+\rangle + c_2|-\rangle$

$$K|\alpha\rangle = c_1^*|+\rangle + c_2^*|-\rangle$$

3) Na base $|S_y, \pm\rangle$ o mesmo esboço fica

$$|\alpha\rangle = \frac{c_1}{\sqrt{2}} [|S_y+\rangle + |S_y-\rangle] + \frac{c_2}{i\sqrt{2}} [|S_y+\rangle - |S_y-\rangle] \\ = \left(\frac{c_1 - ic_2}{\sqrt{2}} \right) |S_y+\rangle + \left(\frac{c_1 + ic_2}{\sqrt{2}} \right) |S_y-\rangle$$

$$K|\alpha\rangle = \frac{c_1^* + ic_2^*}{\sqrt{2}} |S_y+\rangle + \frac{c_1^* - ic_2^*}{\sqrt{2}} |S_y-\rangle = c_1^*|+\rangle - c_2^*|-\rangle$$

\Rightarrow A AÇAD de K depende da base. O produto

$$\theta = UK$$

assume formas diferentes em diferentes bases. Vamos provar então

que $\theta = UK$:

$$(a) \quad \theta (c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle) = U^\dagger (c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle) \\ = c_1^\dagger U^\dagger |\alpha\rangle + c_2^\dagger U^\dagger |\beta\rangle = c_1^\dagger \theta |\alpha\rangle + c_2^\dagger \theta |\beta\rangle$$

(b) Fixamos uma base $|a_n\rangle$. Então

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \theta |\alpha\rangle = U^\dagger \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \alpha \rangle = \sum_n \langle \alpha | a_n \rangle U |a_n\rangle$$

$$|\tilde{\beta}\rangle = \theta |\beta\rangle = \sum_m \langle \beta | a_m \rangle U |a_m\rangle$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \sum_{n,m} \langle a_m | \beta \rangle \underbrace{\langle a_m | U^\dagger U |a_n\rangle}_{\delta_{mn}} \langle \alpha | a_n \rangle = \sum_n \langle \alpha | a_n \rangle \langle a_n | \beta \rangle \\ = \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

Depois dessas discussões vamos definir Θ , o operador de reversão temporal, e verificar que ele é anti-unitário. Θ que espelha esse operador é que ele troque $P \rightarrow -P$; $J \rightarrow -J$ mas $X \rightarrow X$.
Olhando a figura clássica na página 164, e dado $|\alpha\rangle$ em $t=0$, então teremos:

$$\Theta \left(1 - \frac{iH(-8t)}{\hbar} \right) |\alpha\rangle = \left(1 - \frac{iH8t}{\hbar} \right) \theta |\alpha\rangle$$

↓
PROPAGA P/ TRÁZ e reverte

↓
reverte e propaga P/ frente.

Então,

$$+ \Theta (iH) |\alpha\rangle = -iH \Theta |\alpha\rangle$$

e Θ tem que ser ANTI-UNITÁRIO. Nesse caso $\Theta (iH) |\alpha\rangle = -i \Theta H |\alpha\rangle$

e $[H, \Theta] = 0$

Se Θ fosse unitário teríamos $-H\Theta = \Theta H$ e, de $H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \rightarrow H(\Theta|E_n\rangle) = -\Theta H|E_n\rangle = -E_n(\Theta|E_n\rangle)$ e produziríamos um estado $-E_n$ p/ todo E_n , o que não pode ser possível (veja, por exemplo a partícula livre).

OBS Operadores anti-unitários são sempre aplicados em kets, não em bras.

PROPRIEDADE IMPORTANTE - Para todo operador linear A ,

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^+ \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle$$

PROVA: seja $\langle \beta | = \langle \beta | A \rightarrow | \tilde{\beta} \rangle = A^+ | \beta \rangle$ e $| \tilde{\alpha} \rangle = \Theta A^+ | \alpha \rangle$.

Então, como

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^+ | \beta \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^+ \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle$$

Se A for um observável, $A^+ = A$, e tomamos $| \beta \rangle = | \alpha \rangle$, então

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A \Theta^{-1} | \tilde{\alpha} \rangle$$

A será par ou ímpar por Θ se $\Theta A \Theta^{-1} = \pm A$. Nesse caso

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\alpha} | A | \tilde{\alpha} \rangle.$$

O operador Θ será especificado agora por dois requerimentos básicos:

(1) $\langle \alpha | P | \alpha \rangle = - \langle \tilde{\alpha} | P | \tilde{\alpha} \rangle \Rightarrow P$ é ímpar por Θ e

$$\Theta^{-1} P \Theta = -P$$

(2) $\langle \alpha | X | \alpha \rangle = + \langle \tilde{\alpha} | X | \tilde{\alpha} \rangle \Rightarrow X$ é par por Θ e

$$\Theta^{-1} X \Theta = X$$

Vejja que essa escolha tem as seguintes consequências:

$$(A) \quad [x_i, p_j] |\alpha\rangle = i\hbar \delta_{ij} |\alpha\rangle$$

$$\begin{aligned} \textcircled{A} [x_i, p_j] |\alpha\rangle &= \underbrace{\textcircled{A} x_i \textcircled{A}^{-1}}_{x_i} \underbrace{\textcircled{A} p_j \textcircled{A}^{-1}}_{-p_j} |\alpha\rangle - \underbrace{\textcircled{A} p_j \textcircled{A}^{-1}}_{-p_j} \underbrace{\textcircled{A} x_i \textcircled{A}^{-1}}_{x_i} |\alpha\rangle \\ &= -(x_i p_j - p_j x_i) |\alpha\rangle = -[x_i, p_j] |\alpha\rangle \end{aligned}$$

e

$\textcircled{A} i\hbar \delta_{ij} |\alpha\rangle = -i\hbar \delta_{ij} |\alpha\rangle \Rightarrow$ a relação de comutação é preservada. Vejja que a propriedade anti-linear é fundamental.

(B)

$$\textcircled{A} J_i \textcircled{A}^{-1} = \textcircled{A} \epsilon_{ijk} p_j p_k \textcircled{A}^{-1} = -\epsilon_{ijk} p_j p_k = -J_i$$

$\Rightarrow J$ é ímpar por \textcircled{A} e

$$[J_i, J_j] = \epsilon_{ijk} i\hbar J_k \rightarrow [-J_i, -J_j] = \epsilon_{ijk} (-i\hbar) (-J_k)$$

e a relação de comutação também é preservada.

(C)

Vejja ainda que, como $\textcircled{A} p = -p \textcircled{A}$

$$p \cdot \textcircled{A} |p'\rangle = -\textcircled{A} p |p'\rangle = -p' \cdot \textcircled{A} |p'\rangle \Rightarrow$$

$$\boxed{\textcircled{A} |p'\rangle = |-p'\rangle}$$

e, da mesma forma

$$\boxed{\textcircled{A} |x'\rangle = |x'\rangle}$$

Na base $|x'\rangle$ temos que

$$|\alpha\rangle = \int |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle dx' = \int \psi(x') |x'\rangle dx'$$

$$\Theta|\alpha\rangle = \int \langle x'|\alpha\rangle |x'\rangle dx' = \int \psi^*(x') \Theta|x'\rangle dx' = \int \psi^*(x') |x'\rangle dx'$$

$\Rightarrow \psi(x') \rightarrow \psi^*(x')$ por reversão temporal.

Da mesma forma vemos que, no espaço dos momentos

$$\psi(p') \rightarrow \psi^*(-p')$$

Ainda no caso de posição, a parte angular de $\psi(x')$ pode ser escrita em termos de $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. Usando a propriedade

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{\ell, -m}(\theta, \varphi) \quad \text{vemos que}$$

$$\Theta | \ell m \rangle = (-1)^m | \ell, -m \rangle$$

Vamos estender essa propriedade para estados de momento angular arbitrários:

$$\Theta | j m \rangle = (-1)^m | j, -m \rangle \quad \text{e} \quad \Theta J_z \Theta^{-1} = -J_z$$

Isso permitirá a operação de reversão temporal em spins. Veremos que a melhor escolha é, na verdade, i^{sum} ao invés de $(-1)^m$, para a fase.

APLICAÇÃO IMPORTANTE: Se H é invariável por reversão temporal e seu auto-estado $|n\rangle$ é NÃO-degenerado, então $\psi_n(x)$ é real (a menos de uma fase global independente de x' .)

PROVA Com $[\Theta, H] = 0$, $|n\rangle$ e $\Theta|n\rangle$ são autofunções com mesmo autovalor. Como ele é NÃO-degenerado

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|\Theta|n\rangle \rightarrow \psi_n(x) = \psi_n^*(x)$$

Note que

$$\langle x' | \hat{A} | \psi \rangle = \psi^*(x')$$

No entanto, se $[\hat{A}, H] = 0$ então temos

$$\hat{A} \left[i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \right] = H |\psi(t)\rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial (\hat{A} |\psi(t)\rangle)}{\partial t} = H (\hat{A} |\psi(t)\rangle) \quad \text{fazendo } t \rightarrow -t$$

$$i\hbar \frac{\partial [\hat{A} |\psi(-t)\rangle]}{\partial t} = H [\hat{A} |\psi(-t)\rangle]$$

$$\boxed{|\psi_{\text{rev}}(t)\rangle = \hat{A} |\psi(-t)\rangle}$$

satisfaz a Eq. de Sch.

Então, $\langle x' | \psi_{\text{rev}}(t) \rangle = \psi_{\text{rev}}(x', t) = \psi^*(x', -t)$

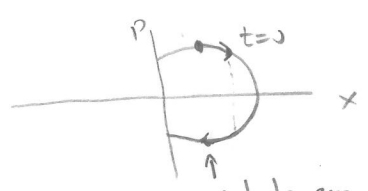
Exemplo: Onda plana propagando-se p/ a direita:
 $i\hbar \partial_x / \hbar - iEt / \hbar$

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - Et)}$$

$$\psi_{\text{rev}}(x, t) = e^{-i(kx - Et)}$$

OBS. Note que $|\psi_{\text{rev}}(t)\rangle = \hat{A} |\psi(-t)\rangle$ é exatamente o que

esperamos classicamente:



estados em $t =$ reflets dos estados em $-t$

REVERSÃO TEMPORAL PARA SISTEMAS DE SPIN 1/2

Os auto-estados $|\hat{n}, +\rangle$ e $|\hat{n}, -\rangle$ e $S_n = \vec{S} \cdot \hat{n}$ podem ser construídos

A partir das rotações do ket $|+\rangle$:

$$|\hat{n}, +\rangle = e^{-iS_z \alpha / \hbar} e^{-iS_y \rho / \hbar} |+\rangle$$

$$(R_y'(\rho) R_z(\alpha) = R_z(\alpha) R_y(\rho))$$

$$|\hat{n}, -\rangle = e^{-iS_z \alpha / \hbar} e^{-\frac{iS_y}{\hbar}(\pi + \rho)} |+\rangle$$

$$(R_y'(\pi + \rho) R_z(\alpha) = R_z(\alpha) R_y(\pi + \rho))$$

De acordo com a relação $\Theta |l, m\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle$ suponho que

$$\Theta |\hat{n}, +\rangle = \eta |\hat{n}, -\rangle \quad \text{onde } \eta = \text{fase a ser fixada.}$$

(esperamos que, para $m=1/2$, $\eta = (-1)^{1/2} = i$). Então, como Θ troca

$$i \rightarrow -i \quad \text{e} \quad S_x \rightarrow -S_x \quad \text{teremos}$$

$$\Theta |\hat{n}, +\rangle = e^{-iS_z \alpha / \hbar} e^{-iS_y \rho / \hbar} \Theta |+\rangle = \eta |\hat{n}, -\rangle = \eta e^{-iS_z \alpha / \hbar} e^{-\frac{iS_y}{\hbar}(\pi + \rho)} |+\rangle$$

$$\Theta |+\rangle = U |+\rangle$$

Então

$$U = \eta e^{-iS_y \pi / \hbar}$$

Obs. Veja que $\Theta (iS_x) = -i \Theta S_x = -i \Theta S_x \Theta^{-1} = iS_x \Theta$

$$\Theta = \eta e^{-\frac{iS_y \pi}{\hbar}} K = -i \eta \left(\frac{2S_y}{\hbar} \right) K$$

$$\Theta = -i \eta \sigma_y K$$

(veja pag 101 : $e^{-\frac{i\vec{S} \cdot \vec{n}}{\hbar} \psi} = \cos \psi / 2 - \frac{i2}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{n} \sin \psi / 2$, com $\vec{n} = \hat{y}$, $\psi = \pi$).

II Vêja que essa relação nos dá que (cancelando η)

$$\boxed{-i\sigma_y K |\hat{n}+\rangle = |\hat{n}-\rangle}$$

De fato, usando $|\hat{n}+\rangle = e^{-i\alpha/\hbar} \cos \rho/\hbar |+\rangle + e^{i\alpha/\hbar} \sin \rho/\hbar |-\rangle$ obtemos

$$\begin{aligned} -i\sigma_y K |\hat{n}+\rangle &= -i\sigma_y \left[e^{i\alpha/\hbar} \cos \rho/\hbar |+\rangle + e^{-i\alpha/\hbar} \sin \rho/\hbar |-\rangle \right] \\ &= -i \left[e^{i\alpha/\hbar} \cos \rho/\hbar (i|-\rangle) + e^{-i\alpha/\hbar} \sin \rho/\hbar (-i|+\rangle) \right] \\ &= e^{i\alpha/\hbar} \cos \rho/\hbar |-\rangle - e^{-i\alpha/\hbar} \sin \rho/\hbar |+\rangle = |\hat{n}-\rangle \end{aligned}$$

Acima usamos que

$$\begin{aligned} \sigma_y |+\rangle &= i|-\rangle \\ \sigma_y |-\rangle &= -i|+\rangle \end{aligned}$$

o que leva a

$$\begin{aligned} \textcircled{+} |+\rangle &= -i\eta \sigma_y K |+\rangle = \eta |-\rangle \\ \textcircled{+} |-\rangle &= -i\eta \sigma_y K |-\rangle = -\eta |+\rangle \end{aligned}$$

Então, tomando um estado genérico

$$|\alpha\rangle = c_1 |+\rangle + c_2 |-\rangle$$

teremos

$$\textcircled{+} |\alpha\rangle = c_1^* \eta |-\rangle - c_2^* \eta |+\rangle \quad e$$

$$\begin{aligned} \textcircled{+} |\alpha\rangle &= \textcircled{+} [c_1^* \eta |-\rangle - c_2^* \eta |+\rangle] \\ &= c_1 \eta^* \textcircled{+} |-\rangle - c_2 \eta^* \textcircled{+} |+\rangle \\ &= -c_1 |\eta|^2 |+\rangle - c_2 |\eta|^2 |-\rangle = -|\alpha\rangle \end{aligned}$$

pois $|\eta| = 1$.

Dessa forma, vemos que, p/ $s=1/2$, $\Theta^2 = -1$, enquanto que p/ s inteiro $\Theta^2 = +1$.

De fato, olhando a expressão que derivamos para

$$d_{m'm}(\beta) = \langle j m' | e^{-iJ_y \beta / \hbar} | j m \rangle, \text{ pag. 138, vemos que}$$

$$d_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k+m'-m} \frac{\sqrt{(j+m)!(j+m')!(j-m)!(j-m)!}}{(j+m-k)!(k-m+m')!(j-k-m)!k!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}$$

Para $\beta=2\pi$, $\sin \pi = 0$ e o único termo que contribui é $k = \frac{m-m'}{2}$, que zera o expoente do seno. Além disso temos que

$$k! = \left(\frac{m-m'}{2}\right)! \Rightarrow \text{se } m' = +m \text{ dá ambos fatoriais NÃO-negativos.}$$

$$(k-m+m')! = \left(\frac{m+m'}{2}\right)!$$

Assim, com $m' = +m$, $k=0$, todos os fatoriais se cancelam

e ficamos com

$$d_{+m,+m}(\pi) = \left(\cos \pi\right)^{2j} = (-1)^{2j} \Rightarrow$$

$$e^{-\frac{2\pi i J_y}{\hbar}} |j m\rangle = (-1)^{2j} |j m\rangle$$

Como $\Theta^2 = e^{-2\pi i J_y / \hbar}$ (prove!) temos que

$$\Theta^2 |j m\rangle = (-1)^{2j} |j m\rangle$$

$$\Theta = \eta e^{-iS_y \pi / \hbar} K$$

$$\Theta^2 = \eta^2 e^{-iS_y 2\pi / \hbar} K^2 = \eta \eta^* e^{-2\pi i S_y / \hbar} K K$$

$$= e^{-2\pi i S_y / \hbar}$$

e usando a convenção de fase tal que

$$\Theta |j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle$$

que, p/ m inteiro fica $(-1)^m$ e p/ $m=1/2$ resulta: $\Theta |+\rangle = i |-\rangle$

$\Theta |-\rangle = -i |+\rangle$, i.e., $\eta = i$.

APLICAÇÃO: DEGENERESCÊNCIA DE KRAMERS

Se um sistema é invariável por reversão temporal, então $[\Theta, H] = 0$.
Em \hbar , se $|n\rangle$ é auto-estado de H , $\Theta|n\rangle$ também é. Em que condições $|n\rangle$ e $\Theta|n\rangle$ são o mesmo estado? Nesse caso temos

$$\begin{aligned}\Theta|n\rangle &= e^{i\pi} |n\rangle \\ \Theta^2|n\rangle &= \Theta e^{i\pi} |n\rangle = e^{-i\pi} \Theta|n\rangle = e^{-i\pi} e^{i\pi} |n\rangle = |n\rangle\end{aligned}$$

Mas, para sistemas com j semi-inteiro, $\Theta^2 = -1$. Portanto, se j é semi-inteiro, $|n\rangle$ e $\Theta|n\rangle$ são estados distintos e o subvalor é, no mínimo, duplamente degenerado! Esse tipo de degenerescência é conhecida como deg. de KRAMERS.

Se sistemas com essas degenerescências são submetidos a campos magnéticos externos, então aparecem acoplamentos do tipo $\vec{S} \cdot \vec{B}$ e $\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}$.

Esses termos quebram a invariância por reversão temporal, pois \vec{S} e \vec{P} são ímpares por Θ e \vec{B} , por ser externo, não muda. Então, a aplicação de um campo magnético quebra a degenerescência induzida pela reversão temporal.

Exemplo: spin $1/2$ no campo $\vec{B} = B_0 \vec{z}$

$$H = \omega S_z, \quad \omega = -eB/mc$$

$$E_+ = \frac{\hbar\omega}{2}; \quad E_- = -\frac{\hbar\omega}{2}$$

