III) Simetrias e Transformações

III.1)

Quando estamos interessados em resolver problemas como $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, a utilização explícita das simetrias do problema pode ser de grande valia na obtenção de autovalores e autovetores do sistema.

Consideremos um operador unitário U que atua no estado $|\psi\rangle$ resultando em $|\widetilde{\psi}\rangle = U|\psi\rangle$. Na representação de coodenadas (por exemplo) temos

$$\langle \mathbf{r}|\widetilde{\psi}\rangle = \langle \mathbf{r}|U|\psi\rangle,$$

mas, pela definição de operador adjunto, temos

$$\langle \widetilde{\mathbf{r}}| \equiv \langle \mathbf{r}|U \quad \Rightarrow \quad |\widetilde{\mathbf{r}}\rangle = U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle,$$

ou ainda,

$$\langle \mathbf{r}|\widetilde{\psi}\rangle = \langle \widetilde{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \psi\left(\widetilde{\mathbf{r}}\right).$$

Resta-nos, então, descobrir como $U^{\dagger}$ atua em $|\mathbf{r}\rangle$. Para tal, vamos assumir que (U infinitesimal)

$$U^{\dagger}\mathbf{r}_{op}U = \mathbf{r}_{op} + \delta\mathbf{r}$$

Como $\mathbf{r}_{op}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$ temos

$$\begin{aligned} U^{\dagger}\mathbf{r}_{op}UU^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle &= \mathbf{r}_{op}U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle + \delta\mathbf{r}\,U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle \\ \Rightarrow \mathbf{r}U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle &= \mathbf{r}_{op}U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle + \delta\mathbf{r}\,U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle \\ \Rightarrow \mathbf{r}_{op}U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle &= \left(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}\right)U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle \end{aligned}$$

ou

$$|\widetilde{\mathbf{r}}\rangle = U^{\dagger}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}\rangle$$

Exemplo: Já vimos que $U = \exp -ipa/\hbar$ translada o estado $\psi\left(q\right)$ de $\underline{a}$ pois

$$\begin{aligned} U\psi\left(x\right) &= \left(1 - ip\frac{a}{\hbar} + \ldots\right)\psi \\ &= \psi - a\frac{d\psi}{dx} + \ldots \\ &= \psi\left(x - a\right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ se U opera em $|\psi\rangle$ de uma certa maneira, o resultado em uma dada representação será o valor de $|\psi\rangle$ no elemento desta representação, obtido da mesma operação, porém de maneira inversa. Como vimos na translação unidimensional

$$\Rightarrow \widetilde{\psi}\left(q\right) = \psi\left(q - a\right) = \psi\left(T^{-1}q\right)$$

Transformações contínuas:

a) Translações em 3-D

Consideremos o estado $|\psi\rangle$ cuja representação de coordenadas e dada por $\psi(\mathbf{r})$. Transladar o estado $\mathbf{a}$ significa que

$$\begin{aligned}
\widetilde{\psi}(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\nabla})^n \psi(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot(-i\hbar)\boldsymbol{\nabla} \right\}^n \frac{\psi(\mathbf{r})}{n!} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p} \right)^n \psi(\mathbf{r}) \\
&= \langle\mathbf{r}| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p} \right) |\psi\rangle \\
\Rightarrow U(\mathbf{a}) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p} \right)
\end{aligned}$$

e, então, $\mathbf{p}$ é o gerador das translações espaciais.

b) Translação da origem dos tempos

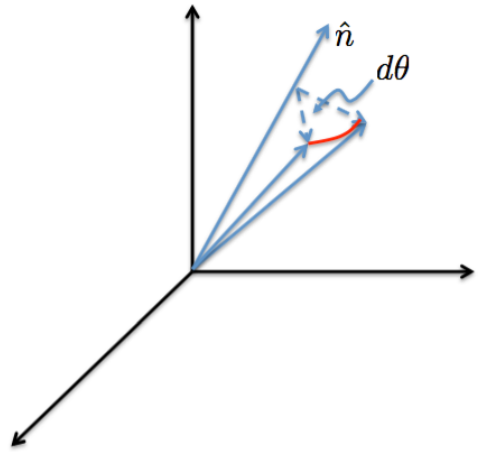
Se investigarmos a evolução de um sistema num intervalo de tempo t e depois transladarmos a origem dos tempos para Δt teremos

$$\begin{aligned}
\widetilde{\psi}(\mathbf{r},t) &= \psi(\mathbf{r},t-\Delta t) \\
&\equiv \psi(\mathbf{r},t) - \frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\Delta t + \ldots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right)^n \psi(\mathbf{r},t) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\,(i\hbar)\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \psi(\mathbf{r},t) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\Delta t H \right)^n \psi(\mathbf{r},t) \\
&= \langle\mathbf{r}| \exp\left(\frac{i}{\hbar} H\Delta t \right) |\psi\rangle \\
\Rightarrow U_T(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t \right),\ (H \neq H(t))
\end{aligned}$$

e, então, a hamiltoniana (se independente do tempo) é a geradora das translações temporais.

c) Rotações

Consideremos a rotação do estado $\psi(\mathbf{r})$ de um ângulo $d\theta$ em torno de um eixo $\hat{n}$



$$
\begin{aligned}
d\mathbf{r} &= d\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r} \\
&= d\omega \times \mathbf{r} \\
\widetilde{\psi}(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r} - d\mathbf{r}) \\
&= \psi(\mathbf{r} - d\theta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r})) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-d\theta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)^n \psi(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} d\theta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) \cdot (-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\right)^n \psi(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} d\theta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}\right)^n \psi(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} d\theta\, \hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})\right)^n \psi(\mathbf{r}) \\
\Rightarrow U(\theta) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta(\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{n}})\right),
\end{aligned}
$$

e o momento angular projetado na direção $\hat{\mathbf{n}}$ é o gerador das rotações de um ângulo θ em torno de $\hat{\mathbf{n}}$.

Quando conhecemos uma determinada tranformação

$$T(\epsilon) = \exp -\frac{i}{\hbar} G\epsilon \quad \text{(contínua)}$$

podemos transformar a hamiltoniana do sistema através de

$$
\begin{aligned}
\widetilde{H} &= e^{-\frac{i}{\hbar}G\epsilon} H e^{\frac{i}{\hbar}G\epsilon} \\
&= \left(1 - i\frac{G\epsilon}{\hbar}\right) H \left(1 + i\frac{G\epsilon}{\hbar}\right) \\
&= H - \frac{i}{\hbar}\epsilon GH + \frac{i}{\hbar}\epsilon HG + \ldots \\
&= H - \frac{i}{\hbar}\epsilon [G, H] + \ldots
\end{aligned}
$$

Se a transformação deixa H invariante, ou seja, $\widetilde{H} = H$, temos $[G, H] = 0$, o que implica no seguinte:

i) G é uma constante de movimento

ii) O princípio da correspondência nos permite determinar G através do conhecimento que temos das invariâncias na física clássica.

iii) G e H tem autoestados comuns.

O item (iii) acima pode ser útil também no caso de simetrias discretas tais como

d) Paridade

O operador paridade é definido como

$$\Pi|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle \Rightarrow \langle\mathbf{r}'|\Pi|\mathbf{r}\rangle = \langle\mathbf{r}'|-\mathbf{r}\rangle = \delta\left(\mathbf{r}+\mathbf{r}'\right)$$

Vamos operar sobre $|\psi\rangle$. Na representação $|\mathbf{r}\rangle$ temos:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3r'|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle \\
\Rightarrow \Pi|\psi\rangle &= \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}'\Pi|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle \\
&= \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3r'|-\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle
\end{aligned}$$

Substituindo $-\mathbf{r}' \to \mathbf{r}'$

$$\begin{aligned}
\Pi|\psi\rangle &= \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3r'|\mathbf{r}'\rangle\langle-\mathbf{r}'|\psi\rangle \\
\Rightarrow \langle\mathbf{r}|\Pi|\psi\rangle &= \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3r'\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\psi\left(-\mathbf{r}'\right) \\
&= \psi\left(-\mathbf{r}\right)
\end{aligned}$$

Este operador goza das seguintes propriedades:

$$\Pi^2|\mathbf{r}\rangle = \Pi|-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle \Rightarrow \Pi^2 = \mathbb{1}$$

$$\text{como } \Pi^{-1}\Pi = \Pi\,\Pi^{-1} = \mathbb{1} \quad \text{temos} \quad \Pi = \Pi^{-1}$$

Por outro lado, como $\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi\rangle = \langle-\mathbf{r}|\psi\rangle$ temos

$$\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi\rangle^* = \langle\psi|-\mathbf{r}\rangle = \langle\psi|\Pi|\mathbf{r}\rangle$$

Mas

$$\begin{aligned}
\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi\rangle^* &= \langle\psi|\Pi^\dagger|\mathbf{r}\rangle = \langle\psi|\Pi|\mathbf{r}\rangle \Rightarrow \Pi = \Pi^\dagger \\
&\Rightarrow \Pi^\dagger = \Pi^{-1} = \Pi
\end{aligned}$$

Auto subespaço de Π

Se $|\psi\rangle$ é tal que $\Pi|\psi_p\rangle = p|\psi_p\rangle$

$$\Pi^2|\psi_p\rangle = p^2|\psi_p\rangle = |\psi_p\rangle \Rightarrow p^2 = 1 \text{ ou } p = \pm 1$$

$$\Rightarrow \Pi|\psi_{(+)}\rangle = |\psi_{(+)}\rangle \text{ e } \Pi|\psi_{(-)}\rangle = -|\psi_{(-)}\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Pi = |\psi_{(+)}\rangle\langle\psi_{(+)}| - |\psi_{(-)}\rangle\langle\psi_{(-)}| \\ \mathbb{1} = |\psi_{(+)}\rangle\langle\psi_{(+)}| + |\psi_{(-)}\rangle\langle\psi_{(-)}| \end{cases}$$

$$
\begin{aligned}
|\psi_{(+)}\rangle\langle\psi_{(+)}| &= \frac{\mathbb{1}+\Pi}{2} \equiv P_{(+)} \\
|\psi_{(-)}\rangle\langle\psi_{(-)}| &= \frac{\mathbb{1}-\Pi}{2} \equiv P_{(-)}
\end{aligned}
$$

$$
P_{(+)}|\psi_{(+)}\rangle = |\psi_{(+)}\rangle \text{ e } P_{(+)}|\psi_{(-)}\rangle = 0
$$

$$
P_{(-)}|\psi_{(+)}\rangle = 0 \text{ e } P_{(-)}|\psi_{(-)}\rangle = |\psi_{(-)}\rangle
$$

$$
\underbrace{\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi_{(+)}\rangle}_{\text{função par}} = \psi_{(+)}\left(-\mathbf{r}\right) \text{ e } \underbrace{\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi_{(-)}\rangle}_{\text{função ímpar}} = -\psi_{(-)}\left(-\mathbf{r}\right)
$$

Sob uma transformação de paridade o operador A transforma-se como $\widetilde{A} = \Pi A \Pi$.

Se $\widetilde{A} = A$, A é par $\Rightarrow A = A_{(+)}$ e $\Pi A_{(+)}\Pi = A_{(+)} \Rightarrow \left[\Pi, A_{(+)}\right] = 0$.

Se $\widetilde{A} = -A$, A é ímpar $\Rightarrow A = A_{(-)}$ e $\Pi A_{(-)}\Pi = -A_{(-)} \Rightarrow \left\{\Pi, A_{(-)}\right\} = 0$

Regras de seleção

i) $\langle\varphi|A_{(+)}|\psi\rangle = \langle\varphi|\Pi A_{(+)}\Pi|\psi\rangle$ e se $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ têm as mesmas paridades nada se pode afirmar quanto ao elemento de matriz. Mas, se $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ têm paridades diferentes, $\langle\varphi|\Pi A_{(+)}\Pi|\psi\rangle = -\langle\varphi|A_{(+)}|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\varphi|A_{(+)}|\psi\rangle = 0$.

ii) $\langle\varphi|A_{(-)}|\psi\rangle = -\langle\varphi|\Pi A_{(-)}\Pi|\psi\rangle$ e se $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ têm paridades diferentes nada se pode afirmar quanto ao elemento de matriz. Mas, se $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ têm a mesma paridade, $-\langle\varphi|\Pi A_{(-)}\Pi|\psi\rangle = -\langle\varphi|A_{(-)}|\psi\rangle$ e $\langle\varphi|A_{(-)}|\psi\rangle = -\langle\varphi|A_{(-)}|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\varphi|A_{(-)}|\psi\rangle = 0$.

Exemplo de um operador ímpar: posição X

$$
\begin{aligned}
\Pi X|\mathbf{r}\rangle &= \Pi X|x,y,z\rangle \\
&= \Pi x|x,y,z\rangle \\
&= x\Pi|x,y,z\rangle \\
&= x|-\mathbf{r}\rangle \\
X\Pi|\mathbf{r}\rangle &= X|-x,-y,-z\rangle \\
&= -x|-\mathbf{r}\rangle \\
\Rightarrow \Pi X + X\Pi = 0 &\Rightarrow X \text{ é ímpar}
\end{aligned}
$$

e) Inversão Temporal

Seja $H \neq H\left(t\right)$ e $|\psi\left(t\right)\rangle$ tal que

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

Substituindo $t \to -t$; $-i\hbar\frac{\partial|\psi(-t)\rangle}{\partial t} = H|\psi\left(-t\right)\rangle$

e a equação de Schrödinger não fica invariante segundo $t \to -t$.
Entretanto, tomando o complexo conjugado desta equação temos

$$
i\hbar\frac{\partial|\psi^*\left(-t\right)\rangle}{\partial t} = H|\psi^*\left(-t\right)\rangle
$$

e, portanto, $|\psi^*\left(-t\right)\rangle$ evolui no tempo como $|\psi\left(t\right)\rangle$.

Seja $T|\psi\left(-t\right)\rangle$ uma generalização de $|\psi^*\left(-t\right)\rangle$

$$
\Rightarrow T|\psi\left(-t\right)\rangle = e^{-iHt/\hbar}T|\psi\left(0\right)\rangle
$$

Como $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$ temos

$$|\psi(-t)\rangle = e^{iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \Rightarrow T|\psi(-t)\rangle = Te^{iHt/\hbar}T^{-1}T|\psi(0)\rangle$$

$$\Rightarrow Te^{iHt/\hbar}T^{-1} = e^{-iHt/\hbar} \text{ ou } Te^{iHt/\hbar} = e^{-iHt/\hbar}T \quad \text{(III.1.1)}$$

Se T fosse unitário $e^{iHt/\hbar} = T^\dagger e^{-iHt/\hbar}T$

$$\Rightarrow H = -T^\dagger HT \Rightarrow TH = -HT$$

Assim,

$$\begin{aligned} TH|\varphi_n\rangle &= E_n T|\varphi_n\rangle \\ HT|\varphi_n\rangle &= -E_n T|\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

e $T|\varphi_n\rangle$ teria energia < 0.

Por outro lado, como $T\mathbf{r}T^{-1} = \mathbf{r}$ e $T\mathbf{p}T^{-1} = -\mathbf{p}$, THT^{-1} deixa H invariante $\Rightarrow [H,T] = 0$

$$\Rightarrow HT|\varphi_n\rangle = E_n T|\varphi_n\rangle$$

Na realidade, T deve ser anti-unitário

i) $\quad T(\lambda|\psi\rangle) = \lambda^* T|\psi\rangle$

ii) $\quad \langle T\psi_1|T\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$

que são obedecidas se $T|\psi\rangle = |\psi^*\rangle$.

Desta forma, aplicando a (III.1.1) em um estado genérico $|\psi\rangle$ temos até 1ª ordem em t,

$$\begin{aligned} T\left(1 + \frac{it}{\hbar}H + ...\right)|\psi\rangle &= \left(1 - \frac{it}{\hbar}H + ...\right)T|\psi\rangle \\ \Rightarrow T\left(\frac{it}{\hbar}H\right)|\psi\rangle &= -\frac{it}{\hbar}HT|\psi\rangle \end{aligned}$$

Mas, como T é anti-unitário devemos ter

$$T\left(\frac{it}{\hbar}H\right)|\psi\rangle = -\frac{it}{\hbar}TH|\psi\rangle$$

que comparado com a expressão anterior nos leva a $[H,T] = 0$.

Vamos agora estudar a aplicação dupla de T. É evidente que ao se aplicar duas vezes o operador de inversão temporal a um estado físico não devemos ter qualquer efeito na física do sistema. Assim,

$$T^2|\psi\rangle = c|\psi\rangle \quad (c \in \mathbb{C}, \text{ e } |c| = 1)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle T\psi_1|\psi_2\rangle &= \langle T\psi_2|T^2\psi_1\rangle \\ &= c\langle T\psi_2|\psi_1\rangle \\ &= c\langle T\psi_1|T^2\psi_2\rangle \\ &= c^2\langle T\psi_1|\psi_2\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow c^2 = 1 \text{ ou } c = \pm 1$$

O valor de c depende do sistema físico considerado. Quando $c = -1$ temos
$\langle T\psi_1|\psi_1\rangle = -\langle T\psi_1|\psi_1\rangle \Rightarrow \langle T\psi_1|\psi_1\rangle = 0 \Rightarrow$auto estados de H são degenerados aos pares com os seus "invertidos temporais". Esta é a *degenerescência de Kramers*.

Transformação de operadores por T

Se $|\widetilde{\alpha}\rangle = T|\alpha\rangle$ e $|\widetilde{\beta}\rangle = T|\beta\rangle \Rightarrow \langle\beta|Q|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|TQ^{\dagger}T^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle$

onde Q é um operador qualquer (não necessariamente hermitiano).

dem:

$$|\gamma\rangle \equiv Q^{\dagger}|\beta\rangle \Rightarrow \langle\gamma| = \langle\beta|Q$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \langle\beta|Q|\alpha\rangle &= \langle\gamma|\alpha\rangle \\
&= \langle\widetilde{\alpha}|\widetilde{\gamma}\rangle \\
&= \langle\widetilde{\alpha}|T|\gamma\rangle \\
&= \langle\widetilde{\alpha}|TQ^{\dagger}|\beta\rangle \\
&= \langle\widetilde{\alpha}|TQ^{\dagger}T^{-1}T|\beta\rangle \\
&= \langle\widetilde{\alpha}|TQ^{\dagger}T^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle \text{ q.e.d}
\end{aligned}$$

Se $|\alpha\rangle = |\beta\rangle$, $\langle\widetilde{\alpha}|\widetilde{Q}|\widetilde{\alpha}\rangle = \langle\alpha|Q|\alpha\rangle$ o que implica em $\widetilde{Q} = TQ^{\dagger}T^{-1}$ e se $Q = Q^{\dagger}$; $\widetilde{Q} = TQT^{-1}$.

Assim vemos que $T\mathbf{p}T^{-1} = -\mathbf{p}$ e $T\mathbf{r}T^{-1} = \mathbf{r}$ pois $\langle\alpha|\mathbf{p}|\alpha\rangle = -\langle\widetilde{\alpha}|\mathbf{p}|\widetilde{\alpha}\rangle$ e $\langle\alpha|\mathbf{r}|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\mathbf{r}|\widetilde{\alpha}\rangle$.

A relação de comutação $[r_i, p_j]$ fica inalterada pois

$$\begin{aligned}
[r_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\
\Rightarrow T\,[r_i, p_j]\,T^{-1} &= -i\hbar\delta_{ij}
\end{aligned}$$

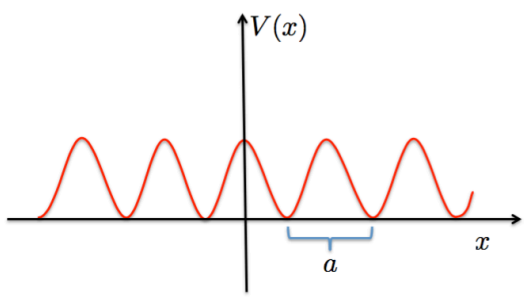
$$\Rightarrow [r_i, -p_j] = -i\hbar\delta_{ij} \text{ ou } [r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

e, portanto, a inversão temporal preserva a quantização canônica.

Aplicações

a) Potencial periódico em 1-D

Consideremos o potencial $V(x)$ tal que $V(x+a) = V(x)$



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

Devido à propriedade de periodicidade de V, temos que

$$H(x,p) = H(x+a,p) \Rightarrow T_a H T_a^{\dagger} = \widetilde{H} = H$$

onde T_a é tal que $\langle x|T_a|\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle$

$\Rightarrow T$ e H possuem auto estados simultâneos. Vamos, então, diagonalizar T_a.

$$\langle x|T_a|\psi\rangle = \lambda\langle x|\psi\rangle$$

Assumindo que $\lambda = e^{ika}$ (T é unitário) temos

$$\begin{aligned}
\langle x+a|\psi\rangle &= e^{ika}\langle x|\psi\rangle \\
\Rightarrow \psi(x+a) &= e^{ika}\psi(x)
\end{aligned}$$

Esta relação é satisfeita se $\psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$ onde $u_k(x+a) = u_k(x)$ pois desta forma

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= e^{ika}e^{ikx}u_k(x+a)\\ &= e^{ika}\left[e^{ikx}u_k(x)\right]\\ &= e^{ika}\psi(x)\end{aligned}$$

Portanto, as auto funções de H são ondas planas moduladas pela função periódica $u_k(x)$. Outro fator importante é que devido ao fato de k e $k+\frac{2\pi}{a}n$ fornecerem o mesmo auto valor e^{ika} de T_a, todos os auto valores deste operador podem ser obtidos se $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$.

Para conhecer $u_k(x)$ temos que resolver a equação de Schrödinger explicitamente.

$$\begin{aligned}\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left[e^{ikx}u_k(x)\right] + V(x)e^{ikx}u_k(x) &= E(k)e^{ikx}u_k(x)\\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{k^2u_k(x) - 2ik\frac{du_k}{dx} - \frac{d^2u_k}{dx^2}\right\} + V(x)u_k(x) &= E_ku_k(x)\end{aligned}$$

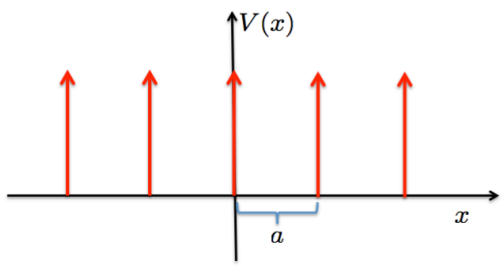
ou

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{-i\frac{d}{dx}+k\right\}^2 u_k(x) + V(x)u_k(x) = E_ku_k(x)$$

onde $u_k(x) = u_k(x+a)$.

A condição de contorno periódica em $u_k(x)$ nos fornece auto valores discretos para um dado k; $E_n(k)$, que são as chamadas bandas de energia deste "sólido" unidimensional.

Um exemplo de simples solução é o modelo de Kronig-Penney onde $V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0\delta(x-na)$



Para $0 < x < a$ temos uma partícula livre $\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$ onde $\hbar q = \sqrt{2mE}$.

Esta forma é idêntica a

$$\psi(x) = e^{ikx}\left[Ae^{i(q-k)x} + Be^{-i(q+k)x}\right]$$

e, portanto,

$$u_k(x) = Ae^{i(q-k)x} + Be^{-i(q+k)x}$$

Como $\psi(x)$ tem que ser contínua, o mesmo vale para $u_k(x)$. Então, $u_k(\epsilon) = u_k(-\epsilon)$ quando $\epsilon \to 0$. Mas como $u_k(x)$ é periódica $u_k(-\epsilon) = u_k(-\epsilon+a)$

$$\Rightarrow u_k(\epsilon) = u_k(-\epsilon+a) \Rightarrow A + B = Ae^{-(q-k)a} + Be^{-i(q+k)a} \qquad \text{(III.1.2)}$$

Por outro lado, integrando a equação de Schrödinger em torno de $x = 0$ temos

$$\begin{aligned}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\left\{E\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\right\}dx &= V_0\psi(0)\\ \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=\epsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=-\epsilon}\right] &= V_0\psi(0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{\epsilon} &= iq(A-B)\\ \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon} &= e^{ika}\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon+a}\\ &= e^{-ika}iq\left(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}\right)\end{aligned}$$

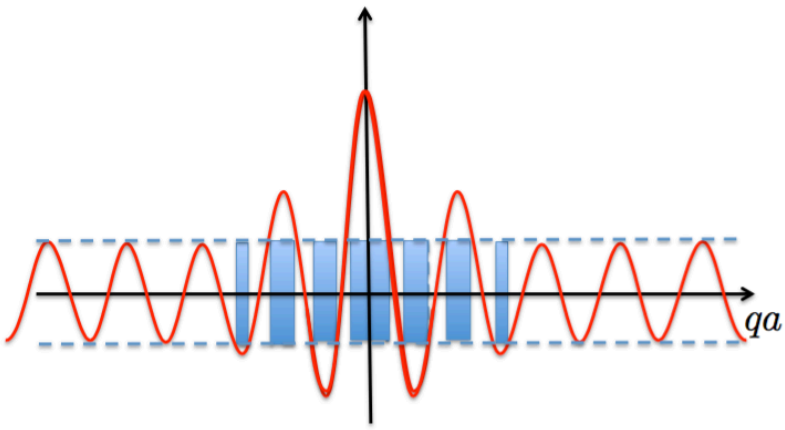
e $\psi(0) = A + B$

$$\Rightarrow iq\frac{\hbar^2}{2m}\left[A - B - Ae^{i(q-k)a} + Be^{-i(q-k)a}\right] = V_0(A+B) \quad \text{(III.1.3)}$$

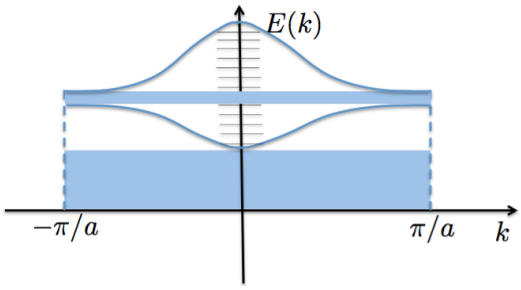
(III.1.2 e 3) formam um sistema 2×2 que nos leva a

$$\cos ka = \cos qa + \frac{mV_0 a}{\hbar^2}\frac{\sin qa}{qa} \quad \text{(III.1.4)}$$

A função do lado direito da equação (III.1.4) está mostrada no gráfico abaixo.



Nas regiões escuras a equação (III.1.4) não pode ser satisfeita porque nelas a função acima representada é, em módulo, maior que 1. Por outro lado, nas demais regiões, para cada k encontramos infinitos valores de q e, consequentemente de $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$, como podemos ver nas regiões claras da figura abaixo.



Quando o sistema é finito existe um nº finito de valores possiveis para k. Suponha qua $Na = L$ onde $N \gg 1$. Vamos assumir condições de contorno periódicas

$$\psi(0) = \psi(L) \quad \text{e} \quad \frac{d\psi}{dx}(0) = \frac{d\psi}{dx}(L)$$

Para a função de onda de Bloch, $u_k(0) = e^{ikL}u_k(L)$ mas $u_k(0) = u_k(Na)$

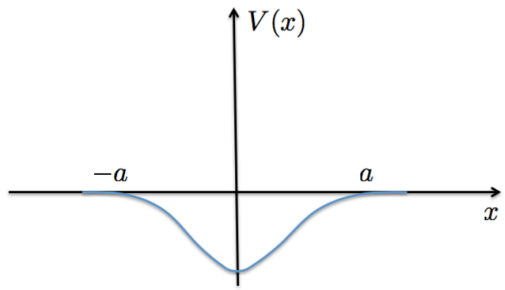
$$\Rightarrow e^{ikNa} = 1 \Rightarrow \begin{cases} k = \pi(2n - N)/L & \text{se } N \text{ é par} \\ k = \pi(2n - N - 1)/L & \text{se } N \text{ é ímpar} \end{cases}$$

pois se $n = N$, $k = \pi/a$.

Temos assim N valores distintos de k em cada banda.

b) Espalhamento unidimensional (qualitativo)

Vamos supor que queremos resolver o problema de uma partícula no potencial simétrico da figura abaixo



$$V(x) = V(-x) \text{ e } V(x) = 0 \text{ se } |x| > a$$

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{cases} Se^{ikx} & \text{se } x > a \\ e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{se } x < -a \end{cases}$$

Como $V(x) = V(-x)$ temos $[\Pi, V] = 0 \Rightarrow H$ e Π têm auto estados simultâneos. Se $E > 0$

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \cos(kx + \delta_0) & \text{se } x > a \\ \cos(kx - \delta_0) & \text{se } x < -a \end{cases} \Rightarrow \psi_0(x) = \psi_0(-x)$$

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \sin(kx + \delta_1) & \text{se } x > a \\ \sin(kx - \delta_1) & \text{se } x < -a \end{cases} \Rightarrow \psi_1(x) = -\psi_1(-x)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(x) &= e^{i\delta_0}\psi_0 + ie^{i\delta_1}\psi_1 \\ &= \begin{cases} \frac{\left(e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1}\right)}{2} e^{ikx} & \text{se } x > a \\ e^{ikx} + \left(e^{2i\delta_0} - e^{-2i\delta_1}\right) e^{-ikx} & \text{se } x < -a \end{cases} \end{aligned}$$

Assim, podemos escrever

$$S = 1 + \sum_{l=0,1} ie^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

$$R = \sum_{l=0,1} i(-1)^l e^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

e as amplitudes de reflexão e transmissão podem ser calculadas conhecendo-se os "phase shifts" dos auto estados de Π. Obviamente a determinação dos "phase-shifts" é trivial no caso de potenciais simples como os seccionalmente constantes ou do tipo delta. Para determiná-los nestes casos usamos explicitamente as condições de contorno. Nos casos mais complicados devemos usar as expressões assintóticas ($x \to \pm\infty$) das soluções exatas do problema ou usar teorias semiclássicas como a aproximação WKB.

Comentário:

A utilização de simetrias em física está intimamente ligada com a teoria de grupos. Durante toda esta seção temos falado de transformações, suas inversas, etc. Na realidade estas tranformações são elementos de um grupo que é um conjunto G com elementos $a, b, c, \ldots$ tal que

i) Dados a e $b \in G$, $ab = c \neq ba \in G$

ii) $(ab)c = a(bc)$ (associatividade)

iii) $\exists$ o elemento e (identidade) tal que $ae = ea = a$

iv) $\exists$ o elemento a^{-1} (inverso) tal que $aa^{-1} = a^{-1}a = e$

Uma tranformação de simetria a que transforma o estado $|\psi\rangle$ em $|\psi_a\rangle$ é tal que $|\psi_a\rangle = U(a)|\psi\rangle$. A matriz $U(a)$ correspondente a a é chamada de representação do elemento a no espaço de estados.