Simetrias na mecânica quântica.

Refs.: Cap. 15, Messiah
Cap. 4, Sakurai; Cap. 6, Desai
Caps. 3 e 13, Ballentine

inicial: revisão teoria de grupos
(p/ detalhes, veja apêndice D, Messiah)

· Definição: conjunto $\mathcal{G}$ de elementos $a, b, c, \ldots$ formam um grupo se:

(i) se $a \in \mathcal{G}$ e $b \in \mathcal{G} \to ab \in \mathcal{G}$

(ii) $\exists$ unidade, i.e., $\exists\ I \in \mathcal{G}$ tal que p/ $\forall\ a \in \mathcal{G}$
$\hookrightarrow Ia = aI = a$

(iii) $\exists$ elemento inverso, i.e., (224.1)
se $a \in \mathcal{G} \to a^{-1} \in \mathcal{G}$ é tal que $aa^{-1} = a^{-1}a = I$

(iv) o produto é associativo: $(ab)c = a(bc)$

· grupo finito: número elementos grupo $= N < +\infty$
N: ordem do grupo

· grupo infinito: número de elementos grupo $N \to +\infty$;
elementos $\mathcal{G} \sim 1$ ou vários parâmetros contínuos

· grupo abeliano: se a e $b \in \mathcal{G} \to ab = ba$

· isomorfismo : dois grupos G e $\hat{G}$ são <u>isomorfos</u> se $\exists$ uma correspondência one-to-one entre os elementos dos dois grupos; essa correspondência conserva a regra de multiplicação.

· homomorfismo : dois grupos G e $\hat{G}$ são homomorfos se a correspondência entre eles <u>não é</u> one-to-one.

· Transformações e grupos de transformações.

· Definição : <u>Transformação</u> $\mathcal{T}$:
uma correspondência one-to-one entre estados $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$
e " " " " observáveis A
associados ao espaço vetorial $\mathcal{E}$, tal que
as propriedades físicas do sistema são preservadas:

$$\text{se } |\psi\rangle \in \mathcal{E} \rightarrow |\psi'\rangle = \mathcal{T}[|\psi\rangle] \in \mathcal{E} \tag{225.1}$$

$$\text{se } A \text{ associado } \mathcal{E} \rightarrow A' = \mathcal{T}[A] \text{ associado } \mathcal{E}$$

notar: a hipótese as propriedades físicas do sistema são preservadas (225.2)
↳ (i) espectro de autovalores observáveis preservado:

$$\text{se } A|n\rangle = a_n|n\rangle \quad \text{e} \quad A' = \mathcal{T}[A] \quad \text{e} \quad |n'\rangle = \mathcal{T}[|n\rangle]$$
$$\hookrightarrow A'|n'\rangle = a_n|n'\rangle \tag{225.3}$$

(ii) probabilidade observação a_n em uma medida do observável A p/ sistema estado $|\psi\rangle$ é preservada:

Eq. (57.1): $\mathcal{P}(a_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2 = |\langle n'|\psi'\rangle|^2$ (espectro A não-degenerado)

(226.1)

de fato, se $|u'\rangle = \Upsilon[|u\rangle]$ e $|v'\rangle = \Upsilon[|v\rangle]$, temos que

$$|\langle u'|v'\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2$$: transformação Υ preserva o produto escalar

(226.2)

Eq. (226.1) $\rightarrow$ relação entre $|u\rangle$ e $|u'\rangle$ via operador unitário T:

$$|u'\rangle = T|u\rangle \tag{226.3}$$

· sobre os observáveis: hipótese (225.2)
↳ valor esperado deve ser preservado:

$$\langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad , \text{ p/ } \forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

(226.4)

$$\xrightarrow{\text{Eq. (226.3)}} \langle\psi|T^\dagger A' T|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

como $|\psi\rangle$ é arbitrário

↳ $A = T^\dagger A' T$ ou $A' = TAT^\dagger$: comparar c/ Eq. (46.1) (226.5)

Obs.: p/ op. densidade $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho}' = \sum_i p_i |\psi'_i\rangle\langle\psi'_i| = \sum_i p_i T|\psi_i\rangle\langle\psi_i|T^\dagger$$

$$= T \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| T^\dagger = T\hat{\rho}T^\dagger \tag{226.6}$$

· Eq. (226.5) → transformação $\mathcal{T}$ preserva a álgebra dos observáveis;

e.g., se $[A, B] = C$

↳ $T(AB - BA)T^\dagger = TAT^\dagger TBT^\dagger - TBT^\dagger TAT^\dagger = TCT^\dagger$

↳ $[A', B'] = C'$

· em princípio, $\forall$ observável $A = F(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n, \ldots)$ onde
$F = F(\xi)$: função $\mathbb{R}$ e
conjunto $\xi_1, \xi_2, \ldots$: conjunto observáveis fundamentais do sistema

como $A' = \mathcal{T}[A] = \mathcal{T}[F(\xi)] = F(\xi')$

↳ a transformação dos obs. fundamentais ξ_n

$$\xi_n' = \mathcal{T}[\xi_n] \tag{227.1}$$

determina a transformação $\mathcal{T}$!

↳ op. unitário T correspondente à transf. $\mathcal{T}$ deve satisfazer:

$$\xi_n' = T \xi_n T^\dagger \tag{227.2}$$

Obs.: verifica-se que o op. unitário T não é completamente determinado a partir de (227.2) pois op. unitário $T_1 = e^{i\alpha} T$, $\alpha \in \mathbb{R}$, também satisfaz (227.2)
(veja Sec. 15.6, Messiah p/ detalhes)

Resumo: p/ cada transformação (unitária) $\mathcal{T}$
∼ associado op. unitário T, definido (a menos de uma fase) pela Eq. (227.2)

notar:

(i) dadas duas transformações τ_1 e τ_2, podemos definir

$\tau_{21} = \tau_2 \tau_1$: produto de duas transformações

como $\tau_{21}[|\psi\rangle] = \tau_2[\tau_1[|\psi\rangle]]$: produto é associativo,
em geral, não-comutativo;

(ii) $\exists$ transf. identidade $\mathcal{I}$: $|\psi'\rangle = \mathcal{I}[|\psi\rangle] = |\psi\rangle$
$A' = \mathcal{I}[A] = A$;

(iii) é possivel definir a transf. inversa τ^{-1} tal que
$\tau\tau^{-1} = \tau^{-1}\tau = \mathcal{I}$

↳ conjunto de transformações τ_i : elementos grupo $\mathcal{G}$!
(grupo de transformações)

em particular, vamos considerar grupos de transformações
espaciais : translações, rotações, inversão espacial
(paridade)

· considerar $[\tau]$: conjunto de transformações $\tau_1, \tau_2, \ldots$;
p/ cada τ_i ~ associado op. unitário T_i ;
↳ $[T]$: conjunto ops. unitários T_i

notar: correspondência entre elementos conjunto $[\tau_i]$
e " " " $[T_i]$
é one-to-one !

· hipótese : conjunto $[\tau_i]$ é um grupo $\mathcal{G}$
↳ NÃO NECESSARIAMENTE → conjunto $[T_i]$ é um grupo :

Lembrar: op. unitário T definido por (227.2) exceto por uma fase -> p/ transf. τ_i, τ_j e τ_k tais que

$\tau_k = \tau_i \tau_j$ ~ associado op. $T_k = e^{i\alpha^k_{ij}} T_i T_j$

se todos $\alpha^k_{ij} = 0$ -> conjunto $[\tau]$ $\xleftrightarrow{\text{ISOMORFISMO}}$ conjunto $[T]$ (one-to-one)

↳ conj. ops. unitários $[T]$: grupo G

ou grupo de transf. $\mathcal{G}$ $\xleftrightarrow{\text{ISOMORFISMO}}$ grupo de operadores unitários G

· caso geral:

p/ cada transf. τ_i ~ associado conjunto (T_i) ops. unitários $T_{i,1}, T_{i,2}, \ldots$ que diferem por uma fase;

nesse caso:

grupo de transf. $\mathcal{G}$ $\xleftrightarrow{\text{HOMOMORFISMO}}$ grupo de operadores unitários G

· p/ as transformações de interesse, temos 2 casos:

(i) p/ cada $\tau_i \in \mathcal{G}$ $\longleftrightarrow$ $T_i \in G$ (ISOMORFISMO)

(ii) p/ cada $\tau_i \in \mathcal{G}$ $\longleftrightarrow$ $\pm T_i \in G$ (HOMOMORFISMO)

Lembrar Ex. caso (ii): rotações sistema spin semi-inteiro, Eq. (170.1)

· próxima etapa: determinar grupo G

p/ grupos contínuos $\mathcal{G}$: translação e rotação e
" " finito $\mathcal{G}$: inversão espacial (paridade)

· considerar : grupo (de transformações) contínuo $\mathcal{G}$
tal que uma transf. finita = conjunto de transf. infinitesimais ;
nesse caso, é necessário considerar apenas as transf. infinitesimais ;

hipótese : elemento $\mathcal{T} = \mathcal{T}(\alpha) \in \mathcal{G}$ depende apenas 1 parâmetro contínuo α ;

temos que $\mathcal{T}(\alpha) \xrightarrow[\alpha \to 0]{} \mathcal{I}$

p/ $|\delta\alpha| \ll 1$, podemos escrever o op. unitário associado à transf. infinitesimal $\mathcal{T}(\delta\alpha)$:

$$T(\delta\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\alpha\, \hat{G} \qquad (230.1)$$

op. hermitiano, gerador transf. infinitesimal $\mathcal{T}(\delta\alpha)$

Lembrar : op. $\hat{G}$ é hermitiano pois op. T é unitário, veja Eqs. (51.1) e (163.3).

como op. T é definido por (227.2), p/ observável fundamental $\mathfrak{Z}$, temos que :

$$\mathfrak{Z} + \delta\mathfrak{Z} = T(\delta\alpha)\, \mathfrak{Z}\, T^{\dagger}(\delta\alpha)$$
$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\alpha\, \hat{G}\right) \mathfrak{Z} \left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta\alpha\, \hat{G}\right) = \mathfrak{Z} - \frac{i}{\hbar}\delta\alpha\, [\hat{G}, \mathfrak{Z}] + O(\delta\alpha^2)$$

$$\hookrightarrow\ [\hat{G}, \mathfrak{Z}] = i\hbar \frac{\delta\mathfrak{Z}}{\delta\alpha} \qquad (230.2)$$

Eq. (230.2) : definição do gerador $\hat{G}$!
(exceto por uma cte)

(1) translações espaciais.

considerar ops. posição $\vec{r} = (x, y, z)$ e momento $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ e uma translação $\mathcal{T}_x(a)$: distância a ao longo eixo $\hat{x}$;

se $T(a)$: op. unitário associado $\mathcal{T}_x(a)$, temos que

$$|\psi'\rangle = T(a)|\psi\rangle$$

e $T(a)\, x\, T^\dagger(a) = x - a$ (231.1)

pois apenas op. x é modificado

· sobre Eq. (231.1),

condição

se $\langle\psi'|x|\psi'\rangle = \langle\psi|x|\psi\rangle + a$ (231.2)

↳ $\langle\psi|T^\dagger(a)\, x\, T(a)|\psi\rangle = \langle\psi|x + a|\psi\rangle$

como $|\psi\rangle$ é arbitrário → $T^\dagger(a)\, x\, T(a) = x + a$

ou $T(a)\, x\, T^\dagger(a) = x - a$

notar condição (231.2) : sob translação, o valor esperado $\langle x\rangle$ da componente x do op. posição $\vec{r}$ se transforma como um vetor (usual) ~ princípio de correspondência;

comparar condição (161.3) p/ notações!

como op. unitário $T(a)$ é definido por (231.1), p/ transf. infinitesimal, temos que:

$$x + \delta x = T(\delta a)\, x\, T^\dagger(\delta a) = x - \delta a \;\rightarrow\; \delta x = -\delta a$$

$\llcorner$ Eq. (230.2) → $[\hat{G}, x] = i\hbar \dfrac{\delta x}{\delta a} = -i\hbar$

além disso: $[\hat{G}, y] = [\hat{G}, z] = [\hat{G}, p_i] = 0$

↳ $\hat{G} = p_x + \mathbb{C}$; $\mathbb{C}$: cte (232.1)

similar p/ translações ao longo eixos y e z!

· caso geral: $\tau(\vec{a})$: translação vetor $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$
notar: $\tau(\vec{a})$ depende 3 parâmetros contínuos a_x, a_y, a_z

p/ translação infinitesimal $\tau(\vec{\varepsilon})$ ~ op. unitário associado

$$T(\vec{\varepsilon}) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} \qquad (232.2)$$

como uma translação finita = conjunto translações infinitesimais:

$$T(\vec{a}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{a}{N} \hat{a} \cdot \vec{p}\right)^N \xrightarrow[N \to +\infty]{} e^{-i\vec{a} \cdot \vec{p}/\hbar} \qquad (232.3)$$

↳ momento $\vec{p}$: gerador de translações espaciais

notar: grupo $\mathcal{G}$ de translações espaciais $\tau(\vec{a})$ $\xleftrightarrow{\text{ISOMORFISMO}}$ grupo G dos op. unitários $T(\vec{a})$

· sobre as propriedades de grupo,

· $T(\vec{a})T(\vec{b}) = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar} e^{-i\vec{b}\cdot\vec{p}/\hbar} \underset{\uparrow}{=} e^{-i(\vec{a}+\vec{b})\cdot\vec{p}/\hbar} = T(\vec{a}+\vec{b})$
pois $[p_i, p_j] = 0$

- $T(\vec{a}+\vec{b}) = e^{-i(\vec{b}+\vec{a})\cdot\vec{p}/\hbar} = e^{-i\vec{b}\cdot\vec{p}/\hbar} e^{-i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar} = T(\vec{b})T(\vec{a})$

↳ $T(\vec{a})T(\vec{b}) = T(\vec{b})T(\vec{a})$

como o produto de transformações é comutativo
↳ grupo de translações é um grupo abeliano

· autovalores op. de translação $T(a)$,
considerar caso 1-D.

$$T(a)|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \qquad (233.1)$$

como $T(a)$ é um op. unitário, podemos escrever $\lambda = e^{-ika}$

↳ $\langle x|T(a)|\psi\rangle = \lambda\langle x|\psi\rangle = e^{-ika}\langle x|\psi\rangle$

Lembrar Eq. (66.1) : $T(a)|x\rangle = |x+a\rangle$;
como $T^{+}(a) = T(-a) \rightarrow T^{+}(a)|x\rangle = T(-a)|x\rangle = |x-a\rangle$
↳ $\langle x|T(a) = \langle x-a|$

$$\hookrightarrow \langle x|T(a)|\psi\rangle = \langle x-a|\psi\rangle = \psi(x-a) = e^{-ika}\psi(x) \qquad (233.2)$$

solução (233.2) : $\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$; $u_k(x+a) = u_k(x)$
(233.3)

notar: $\psi_k(x-a) = e^{ik(x-a)}\underbrace{u_k(x-a)}_{u_k(x)} = e^{-ika}\underbrace{e^{ikx}u_k(x)}_{\psi_k(x)}$

Eq. (233.3) : autovetores $T(a)$ = (onda plana) * (função periódica, período a) :
: função de onda de Bloch

notar: $e^{-ika} = e^{-i(k+2\pi n/a)a}$; $n \in \mathbb{Z}$
↳ podemos considerar apenas o intervalo
$-\pi \leq ka \leq \pi$: 1ª zona de Brillouin !

(2) rotações,

Lembrar discussão rotações cap. 13:

- p/ cada rotação R ~ matriz ortogonal $R_{3\times3}$:

$$RR^t = R^t R = 1_{3\times3}$$

$$\text{e } \det R = 1$$

conjunto das matrizes R = grupo $SO(3)$:

S: "special" ~ $\det R = +1$

$O(3)$: matrizes ortogonais 3×3

- p/ cada rotação R ~ associado op. unitário $U(R) = U_{\hat{n}}(\theta)$:

$$U_{\hat{n}}(\theta) = e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}/\hbar} \quad : \text{Eq. (165.3)}$$

↳ momento angular $\vec{J}$: gerador de rotações

- Eq. (166.3) determinada a partir de:

p/ op. escalar S e op. vetorial $\vec{V} = (V_1, V_2, V_3)$;

se $|\psi'\rangle = U(R)|\psi\rangle$

↳ $\langle\psi'|S|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(R)\,S\,U(R)|\psi\rangle = \langle\psi|S|\psi\rangle$

condição (234.1)

$\langle\psi'|V_i|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(R)\,V_i\,U(R)|\psi\rangle = \sum_j R_{ij}\langle\psi|V_j|\psi\rangle$

: análogos de (231.1)

op. unitário associado rotação infinitesimal:

$$U_{\hat{n}}(\epsilon) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon\,\hat{n}\cdot\vec{J} \quad : \text{Eq. (163.3)}$$

Eqs. (163.3) ⊕ (234.1) → Eqs. (165.1):

$[J_i, S] = 0$: análogos Eq.(230.2)
$[J_i, V_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$

· conjunto de ops. unitários $U(R)$ = grupo G :

- p/ sistema spin inteiro:
grupo de rotações R $\xleftrightarrow{\text{ISOMORFISMO}}$ grupo G dos ops. unitários $U(R)$

- p/ sistema spin semi-inteiro:
grupo de rotações R $\xleftrightarrow{\text{HOMOMORFISMO}}$ grupo G dos ops. unitários $U(R)$
p/ cada rotação R ~ associado $\pm U(R)$!

· Leis de conservação.

considerar:

grupo de transformações $\mathcal{G}$ e grupo de ops. unitários G

p/ cada transf. $\tau_i \in \mathcal{G}$ ~ op. unitário $T_i \in G$

· se observável Q é invariante w.r.t. transf. τ_i

↳ $T_i Q T_i^\dagger = Q \rightarrow [Q, T_i] = 0$, p/ $\forall\, T_i \in G$ (236.1)

· discussão similar notações, veja pg. 176;

considerar vetores $|\alpha j \mu\rangle$: base ~ representação grupo G

α : conjunto de números quânticos

j : indica o subespaço irredutível

(análogo $\mathcal{E}(j)$ p/ momento angular)

μ : distinção vetores $\in$ subespaço irredutível

(análogo número quântico m p/ momento angular)

· notação → caso geral, transf. τ_i:

base : $|\alpha j m\rangle \longrightarrow |\alpha j \mu\rangle$

Lembrar Eq. (208.2),

elemento de matriz

$\langle \alpha' j' m' | S | \alpha j m\rangle = \delta_{jj'}\, \delta_{mm'}\, S^{(j)}_{\alpha'\alpha}$ independe m

onde S : op. escalar, i.e., $[S, \vec{J}] = 0$ ~ $[U(R), S] = 0$

verifica-se que Eq. (208.2) pode ser generalizado p/ caso (236.1), i.e., observável Q invariante w.r.t. transf. τ_i :

$$\langle \alpha' j' \mu' | Q | \alpha j \mu \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} \, Q^{(j)}_{\alpha'\alpha} \qquad (237.1)$$

elemento de matriz
independe μ

Obs.: p/ demonstração via teoria de representação de grupos, veja apêndice D, Messiah.

demonstração alternativa: similar caso particular notações, vejá pg. 208;

nesse caso, é necessário encontrarmos:

(i) conjunto de observáveis $A_k = A_k(T_i)$, $k = 1, 2, \ldots$
tais que $[A_k, T_i] = 0$, p/ $\forall \; T_i \in G$
e autovalores A_k: $a = a(j)$

e

(ii) conjunto de observáveis $B_k = B_k(T_i)$, $k = 1, 2, \ldots$
tais que $[M_k, M_{k'}] = 0$ mas $\exists \; T_i$ tal que $[M_k, T_i] \neq 0$
e autovalores B_k: $b = b(\mu)$

se vetores $|\alpha j \mu\rangle$: base tal que conjunto vetores A e B diagonais $\to$ Eq. (237.1)!

Ex.: notação: 1 observável A: J^2
" " B: J_z

· observável Q na representação ~ vetores $|\alpha j \mu\rangle$

$$Q = \begin{bmatrix} Q^{(j_1)} & 0 & \cdots \\ 0 & Q^{(j_2)} & \\ \vdots & & \ddots \end{bmatrix} \qquad (237.2)$$

; $Q^{(j)}$: matrizes ▨;
elemento matriz $Q^{(j)}_{\alpha'\alpha}$
(comparar Eq. (172.1))

- sobre a degenerescência autovalores Q, notar:

(i) p/ j fixo : diagonalização matriz $Q^{(j)}$

↳ $q^{(j)}$'s : autovalores;

considerar degenerescência $q^{(j)}$'s = p (j e s fixos!)

(ii) se possiveis valores $\mu = 1, 2, \ldots, d_j$

(análogo $2j+1$ valores m p/ notação)

↳ degenerêscia autovalores $Q = p d_j$

notar: 2 contribuições distintas p/ degenerescência

em particular, se $d_j \neq 0$, p/ j fixo : degenerescência associada à invariância Q w.r.t. grupo $\mathcal{G}$ de transf. $\mathcal{T}_i$

ou $[Q, T_i] = 0$ p/ $\forall\, T_i \in G$.

· sobre a simetria do hamiltoniano.

hipótese: H invariante w.r.t. transf. $\mathcal{T}_i \in \mathcal{G}$

↳ $[H, T_i] = 0$, p/ $\forall\, T_i \in G$ (238.1)

↳ H e observáveis do tipo $A_k = A_k(T_i)$ e $B_k = B_k(T_i)$ podem ser simultaneamente diagonalizados

e espectro H apresenta degenerescência ~ grupo G !

alternativa (similar discussão pg. 177):

se $H|\alpha i\rangle = E_\alpha |\alpha i\rangle$; $i = 1, 2, \ldots, g_\alpha$

conjunto números quânticos

↳ $T_k H |\alpha i\rangle = H (T_k|\alpha i\rangle) = E_\alpha (T_k|\alpha i\rangle)$

Eq. (238.1)

se $|\alpha i\rangle$: autovetor H associado autovalor E_α
↳ $T_k|\alpha i\rangle$: " " " " " , i.e.,
(parte) degenerescência espectro H ~ invariância H
w.r.t. $\tau_i \in \mathcal{G}$.

· similar mecânica clássica :
se ∃ simetria -> ∃ lei de conservação

Lembrar: eq. de movimento $\langle A\rangle$, Eq. (76.1),

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \langle \partial_t A\rangle$$

↳ se $A \neq A(t)$ e $[A,H] = 0$ → obs. A é cte de movimento

notar: se $[H, T_i] = 0$ (simetria)
↳ p/ ∀ observável $O = O(T_i)$ -> $[H, O] = 0$
se $O \neq O(t)$ -> obs. O é cte de movimento
(lei de conservação)

em particular, p/ transfs. τ_i contínuas,

$$T(\theta) = e^{i\theta\hat{G}/\hbar}$$; θ : parâmetro contínuo
$\hat{G}$: gerador transf. simetria $\tau(\theta)$

se $[T(\theta), H] = 0$ -> $e^{i\theta\hat{G}/\hbar} H e^{-i\theta\hat{G}/\hbar} = H$

p/ transf. infinitesimal $\theta \ll 1$ (apenas essa análise é necessária) :

$$\left(1 + \frac{i\theta}{\hbar}\hat{G}\right) H \left(1 - \frac{i\theta}{\hbar}\hat{G}\right) \simeq H$$

$$H + \frac{i\theta}{\hbar}[\hat{G}, H] + O(\theta^2) \simeq H \;\rightarrow\; [\hat{G}, H] = 0$$

temos que,

(1) Gerador $\hat{G}$ é uma cte de movimento;

(2) se o sistema possui análogo clássico

↳ princípio de correspondência → determinação $\hat{G}$;

(3) H e $\hat{G}$ podem ser diagonalizados simultaneamente.

Ex. 1: invariância translacional,

se H invariante w.r.t. translações

↳ $[H, T(\vec{\epsilon})] = 0 \rightarrow [H, \vec{p}] = 0 \rightarrow p_x, p_y, p_z$: cte de movimento

como $[p_i, p_j] = 0 \rightarrow$ valores cte de p_x, p_y e p_z podem ser simultaneamente determinados.

Ex. 2: invariância rotacional,

se H invariante w.r.t. rotações

↳ $[H, U_{\hat{n}}(\epsilon)] = 0 \rightarrow [H, \vec{J}] = 0 \rightarrow J_x, J_y, J_z$: cte de movimento

· sobre evolução temporal estado $|\psi(t)\rangle$,

Lembrar eq. de movimento op. evolução temporal:

$$i\hbar \frac{dU(t,t_0)}{dt} = H(t)U(t,t_0) \quad : \quad \text{Eq. (72.5)}$$

↳ sol. formal: $U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\,U(t',t_0)$: Eq. (74.1)

$$T_i\,(74.1)\,T_i^\dagger \; : \; T_i U(t,t_0) T_i^\dagger = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \underbrace{T_i H(t') U(t',t_0) T_i^\dagger}_{\stackrel{[H,T_i]=0}{=} H(t')\left(T_i U(t',t_0) T_i^\dagger\right)}$$

Como $U(t,t_0)$ e $T_i U(t,t_0) T_i^\dagger$ satisfazem a mesma eq. integral

$\hookrightarrow U = T_i U T_i^{\dagger} \rightarrow [U(t,t_0), T_i] = 0$ p/ $\forall\, T_i \in G$ (241.1)

notar: se $|\psi(t)\rangle$ sol. eq. de movimento (73.1):

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle$$

$$\hookrightarrow i\hbar \frac{d}{dt}\left(T_i|\psi(t)\rangle\right) = T_i H(t)|\psi(t)\rangle = H(t)\left(T_i|\psi(t)\rangle\right)$$

$\hookrightarrow T_i|\psi(t)\rangle$ é sol. eq. de movimento (73.1)

em particular, se $|\phi(0)\rangle = T_i|\psi(0)\rangle$

$$\hookrightarrow |\phi(t)\rangle = U(t,0)|\phi(0)\rangle = U(t,0)T_i|\psi(0)\rangle \underset{\text{Eq. (241.1)}}{=} T_i U(t,0)|\psi(0)\rangle$$

$$= T_i|\psi(t)\rangle\text{, i.e.,}$$

se, inicialmente, $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ relacionados via transf. T_i
e $[H, T_i] = 0 \rightarrow$ relação entre estados $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$
é preservada p/ $t > 0$! (241.2)

Resumo: se H invariante w.r.t. transf. $T_i \in G$
$\hookrightarrow$ eq. movimento $|\psi(t)\rangle$ " " " " " ";
verifica-se que "VOLTA" OK (veja Sec. 15.13, Messiah)

Ex.: considerar observável A: $A|n\rangle = a_n|n\rangle$: espectro não-degenerado

estado inicial

$$|\psi(0)\rangle \xrightarrow{U(t,0)} \underset{t}{\big|} \xrightarrow{\text{MEDIDA } A = a_n} |n\rangle \quad \text{(i)}$$

T_i : $\Big\downarrow$ mesma evolução temporal

$$T_i|\psi(0)\rangle \xrightarrow{U(t,0)} \underset{t}{\big|} \xrightarrow{\text{MEDIDA } T_i A T_i^{\dagger} = a_n} T_i|n\rangle \quad \text{(ii)}$$

notar (i) → (ii): estado inicial $|\psi\rangle$ e medidor (observável A)
submetidos à mesma transformação
de simetria T_i;
hipótese $[H, T_i] = 0$;

temos que:

(i) $|\langle n | U(t,0) | \psi(0)\rangle|^2$: probabilidade medida
observável A em $t = a_n$ p/ (i)

(ii) $|(\langle n | T_i^\dagger) U(t,0) (T_i |\psi(0)\rangle)|^2 = |\langle n | \underbrace{T_i^\dagger U(t,0) T_i}_{\text{Eq. (241.1)} \; = U(t,0)} |\psi(0)\rangle|^2$:

: exemplo (241.2)!

· Transformações discretas: inversão espacial (paridade)
(p/ detalhes veja Sec. 4.2, Sakurai)

· definição operador paridade π.

se $|\psi'\rangle = \pi|\psi\rangle$

↳ $\langle\psi'|\vec{x}|\psi'\rangle = -\langle\psi|\vec{x}|\psi\rangle$: notar similaridade
↳ condição Eq. (231.2)

↳ $\langle\psi|\pi^\dagger \vec{x}\, \pi|\psi\rangle = \langle\psi|(-\vec{x})|\psi\rangle$

(242.1)

como $|\psi\rangle$ é arbitrário → $\pi^\dagger \vec{x}\, \pi = -\vec{x}$ ou $\pi \vec{x}\, \pi^\dagger = -\vec{x}$
(π: op. unitário, veja abaixo)

notar: $\pi^\dagger \vec{x}\, \pi |\vec{x}'\rangle = -\vec{x}|\vec{x}'\rangle = -\vec{x}'|\vec{x}'\rangle$

$\pi *$: $\vec{x}(\pi|\vec{x}'\rangle) = -\vec{x}'(\pi|\vec{x}'\rangle)$,

i.e. $\pi|\vec{x}'\rangle$ autovetor op. $\vec{x}$, autovalor $\vec{x}'$.

↳ $\pi|\vec{r}'\rangle = e^{-i\alpha}|\vec{r}'\rangle$;

escolha usual : $\alpha = 0$ → $\pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$ (243.1)

↳ p/ estado $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle = \int d^3r' \, |\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle$$

↳ $\pi|\psi\rangle = \int d^3r' \, \pi|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \int d^3r' \, |-\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle$

(243.2)

↳ $\langle\vec{r}|\pi|\psi\rangle = \int d^3r' \, \langle\vec{r}|-\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \psi(-\vec{r})$: ação op. π sob função de onda

· propriedades op. π,

(i) $\pi^2|\vec{r}\rangle = \pi|-\vec{r}\rangle = |\vec{r}\rangle$ → $\pi^2 = 1$ → $\pi^{-1} = \pi$

(ii) $\langle\vec{r}|\pi|\psi\rangle = \langle-\vec{r}|\psi\rangle$

↳ $\langle\vec{r}|\pi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\pi^+|\vec{r}\rangle = \langle\psi|-\vec{r}\rangle = \langle\psi|\pi|\vec{r}\rangle$

como $|\psi\rangle$ é arbitrário → $\pi^+|\vec{r}\rangle = \pi|\vec{r}\rangle$

e como vetores $|\vec{r}\rangle$: base → $\pi^+ = \pi$

(243.3)

↳ $\pi = \pi^{-1} = \pi^+$: π op. hermitiano e unitário!

· problema de autovalores π,

se $\pi|\psi_p\rangle = p|\psi_p\rangle$

↳ $\pi^2|\psi_p\rangle = p^2|\psi_p\rangle = |\psi_p\rangle$ → $p = \pm 1$: autovalores π

↳ $\pi = |\psi_+\rangle\langle\psi_+| - |\psi_-\rangle\langle\psi_-|$: decomposição espectral

$1 = |\psi_+\rangle\langle\psi_+| + |\psi_-\rangle\langle\psi_-|$: relação de completeza

Projetores : $P_p = |\psi_p\rangle\langle\psi_p| = \frac{1}{2}(\hat{1} + p\pi)$; $p = \pm 1$ (244.1)

notas :

como $\langle\vec{r}|\pi|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$

↳ $\psi_+(-\vec{r}) = \langle\vec{r}|\pi|\psi_+\rangle = +\langle\vec{r}|\psi_+\rangle = \psi_+(\vec{r})$: função par

$\psi_-(-\vec{r}) = \langle\vec{r}|\pi|\psi_-\rangle = -\langle\vec{r}|\psi_-\rangle = -\psi_-(\vec{r})$: função ímpar (244.2)

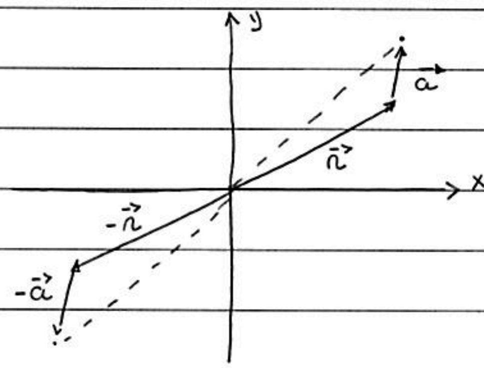
· se $[H, \pi] = 0$

↳ autovetores H : paridade definida

Ex. : autovetores (112.1) oscilador harmônico 1·D (verificar)

· sobre os momentos linear e angular.

como : translação espacial $\vec{a}$ ⊕ inversão = inversão ⊕ translação espacial $-\vec{a}$



↳ $T(\vec{a})\,\pi = \pi\, T(-\vec{a})$

$e^{-i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar}\,\pi = \pi\, e^{+i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar}$

p/ uma translação infinitesimal $a \ll 1$, temos que

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{p}\right)\pi \simeq \pi\left(1 + \frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{p}\right)$$

$\hookrightarrow \{\vec{a}\cdot\vec{p}, \pi\} = 0 \rightarrow \{\vec{p}, \pi\} = 0$ ou $\pi\vec{p}\pi^{+} = -\vec{p}$ (245.1)

como $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ ⊕ Eqs. (242.1) e (245.1)

$\hookrightarrow \pi\vec{L}\pi^{+} = +\vec{L}$; (245.2)

considerando (245.2) válida p/ ∀ momento angular $\vec{J}$, temos que

$$\pi\vec{J}\pi^{+} = \vec{J} \quad (245.3)$$

· harmônicos esféricos,

$$\langle \vec{n}|\pi|\ell m\rangle = \pi Y_\ell^m(\theta,\varphi) = Y_\ell^m(\pi-\theta, \varphi+\pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

ou $\pi|\ell m\rangle = (-1)^\ell |\ell m\rangle$ (245.4)

Lembrar Eq. (152.3):

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = (-1)^\ell \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(2\ell)!\,(\ell-m)!}}\, e^{im\varphi} \sin^{-m}\theta \frac{d^{\ell-m}}{d\cos\theta^{\ell-m}} \sin^{2\ell}\theta$$

como $\sin(\pi-\theta) = \sin\theta$; $\cos(\pi-\theta) = -\cos\theta$;

$e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}$ $\rightarrow$ Eq. (245.4)

· sobre a paridade de observáveis,

considerar operadores A e B tais que

· $\pi A \pi^+ = +A$ -> op. A é par sob paridade

· $\pi B \pi^+ = -B$ -> op. B é impar sob paridade

Ex.: ops. $\vec{r}$ e $\vec{p}$: ops. impares sob paridade
op. $\vec{J}$: " par " "

· considerar estados $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$, estados com paridade definida; temos que

(i) $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\pi A \pi^+|\psi\rangle$

↳ se paridades $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ iguais -> $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ pode ser $\neq 0$
" " " " " opostas " " $= 0$

(246.1)

(ii) $\langle\varphi|B|\psi\rangle = -\langle\varphi|\pi B \pi^+|\psi\rangle$

↳ se paridades $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ iguais -> $\langle\varphi|A|\psi\rangle = 0$
" " " " " opostas " " pode ser $\neq 0$

Eq (246.1) : regras de seleção !

Ex.: momento de dipolo elétrico permanente
(p/ detalhes, veja Sec. 13.1, Ballentine).

definição: momento de dipolo elétrico sistema n partículas,

$$\vec{d} = \sum_{j=1}^{n} \underbrace{q_j}_{\text{carga partícula } j} \vec{r}_j \qquad (246.2)$$

Eq. (242.1) : $\pi \vec{d} \pi^+ = -\vec{d}$: op. $\vec{d}$ impar sob paridade definição : se $|\psi\rangle$ é um estado estacionário tal que $\langle\psi|\vec{d}|\psi\rangle \neq 0 \rightarrow |\psi\rangle$ possui momento de dipolo elétrico permanente

notar : se $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ e $[H, \pi] = 0$

$\hookrightarrow \pi H|\psi\rangle = H(\pi|\psi\rangle) = E(\pi|\psi\rangle)$

se autovalor E não-degenerado $\rightarrow \pi|\psi\rangle = c|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$

$\hookrightarrow |\psi\rangle$: paridade definida

$\hookrightarrow \langle\psi|\vec{d}|\psi\rangle = 0$ (p/ autovalor E não-degenerado)

Obs. : se autovalor E degenerado $\rightarrow \langle\vec{d}\rangle$ pode ser $\neq 0$;

Ex. : átomo H , nível $n=2$

se $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|200\rangle + |210\rangle\right) \rightarrow \langle\vec{d}\rangle \neq 0$!

Obs. : (i) grupo associado paridade : $Z_2 = \{+1, -1\}$

(ii) vetores usuais sob inversões espacial e temporal:

	inv. espacial		inv. temporal
	$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$	vetores polares	$\vec{r} \rightarrow \vec{r}$
$\vec{v} = d\vec{r}/dt$	$\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$		$\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$
$\vec{p} = m\vec{v}$	$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$		$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$
$\vec{F} = d\vec{p}/dt$	$\vec{F} \rightarrow -\vec{F}$		$\vec{F} \rightarrow +\vec{F}$
	$\vec{E} \rightarrow -\vec{E}$		$\vec{E} \rightarrow +\vec{E}$ (247.1)
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\vec{L} \rightarrow +\vec{L}$	vetores axiais	$\vec{L} \rightarrow -\vec{L}$
$\vec{N} = \vec{r} \times \vec{F}$	$\vec{N} \rightarrow +\vec{N}$		$\vec{N} \rightarrow +\vec{N}$
	$\vec{B} \rightarrow +\vec{B}$		$\vec{B} \rightarrow -\vec{B}$

· Resumo: operadores $\vec{r}$, $\vec{p}$ e $\vec{J}$ sob paridade:

$$\pi \vec{r} \pi^+ = -\vec{r}$$
$$\pi \vec{p} \pi^+ = -\vec{p} \qquad (248.1)$$
$$\pi \vec{J} \pi^+ = +\vec{J}$$

· Inversão temporal.

· inicial: operadores antilineares.

· teorema: considerar uma transformação τ tal que
- τ: definida exceto por uma cte arbitrária e
- τ preserva o produto escalar

↳ τ é uma transf. unitária linear ou
" antilinear

(p/ demonstração, veja Sec. XV.2, Messiah)

em detalhes:

se $|u'\rangle = \tau[|u\rangle]$ e $|v'\rangle = \tau[|v\rangle]$;

como τ preserva o produto escalar: $|\langle u'|v'\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2$;
temos duas possibilidades:
se $\langle u'|v'\rangle = \langle u|v\rangle$: τ unitária e linear (248.2)
se $\langle u'|v'\rangle = \langle u|v\rangle^*$: " " " antilinear

· Lembrar definição op. linear A, Eq. (15.1):

$$A(\lambda|u\rangle + \mu|v\rangle) = \lambda(A|u\rangle) + \mu(A|v\rangle)$$

· Definição: operador antilinear A:

$$A(\lambda|u\rangle + \mu|v\rangle) = \lambda^*(A|u\rangle) + \mu^*(A|v\rangle), \qquad (248.3)$$

p/ $\forall$ $|u\rangle$ e $|v\rangle \in \mathcal{E}$ e $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$

propriedades:

(i) $\lambda A = A \lambda^*$; $\lambda \in \mathbb{C}$ (249.1)

(ii) se A e B ops. antilineares
↳ $C = A + B$ " "

(iii) produtos ops. A e B:

$$(AB)|u\rangle = A(B|u\rangle) \quad , \text{ p/ } \forall \; |u\rangle \in \mathcal{E}$$

↳ se A e B ops. antilineares → (AB): op. linear:

$$AB(\lambda|u\rangle + \mu|v\rangle) = A(\lambda^* B|u\rangle + \mu^* B|v\rangle) = \lambda(AB|u\rangle) + \mu(AB|v\rangle)$$

↳ se A op. antilinear e B op. linear → (AB): op. antilinear:

$$AB(\lambda|u\rangle + \mu|v\rangle) = A(\lambda B|u\rangle + \mu B|v\rangle) = \lambda^*(AB|u\rangle) + \mu^*(AB|v\rangle) \quad (249.2)$$

(iv) op. inverso: similar op. linear,

se $|v\rangle = A|u\rangle$ e $|u\rangle = B|v\rangle$ → op. antilinear B inverso
" " A
(e vice-versa)

ou $AB = BA = 1$

• ação op. antilinear A sob bras,
considerar bra correspondente Eq. (248.3):

$$(\lambda\langle u| + \mu\langle v|)A = \lambda^*(\langle u|A) + \mu^*(\langle v|A) \quad (249.3)$$

· lembrar Eq. (17.4), p/ op. A linear:

$$\left(\langle\chi|A\right)|u\rangle = \langle\chi|\left(A|u\rangle\right) = \langle\chi|A|u\rangle$$

· Eq. (249.2) → p/ op. A antilinear:

$$\left(\langle\chi|A\right)|u\rangle = \left(\langle\chi|\left(A|u\rangle\right)\right)^{*} \qquad (250.1)$$

não podem ser omitidos

Ex.: necessidade utilização (...):

(1) $\langle\psi|(\lambda A) = \lambda^{*}\left(\langle\psi|A\right) = \langle\psi|(A\lambda)$

Eq. (249.2) Eq. (249.1)

(2) $\langle\psi|AB|\varphi\rangle$: NOT OK

Eq. (250.1)

$$\langle\psi|(AB)|\varphi\rangle = \left(\langle\psi|AB\right)|\varphi\rangle = \left(\left(\langle\psi|A\right)\left(B|\varphi\rangle\right)\right)^{*}$$

$$= \langle\psi|\left(AB|\varphi\rangle\right)$$

(3) $A|u\rangle\langle v|w\rangle$: NOT OK

$$\left(A|u\rangle\langle v|\right)|w\rangle = A\left(|u\rangle\langle v|w\rangle\right) = \left(A|u\rangle\right)\langle v|w\rangle^{*}$$

(4) $\langle w|A|u\rangle\langle v|$: NOT OK

$$\langle w|\left(A|u\rangle\langle v|\right) = \left(\langle w|A\right)|u\rangle\langle v| = \left(\langle w|\left(A|u\rangle\right)\right)^{*}\langle v|$$

· operador adjunto A^{+},

Se $|\psi\rangle = A|\varphi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi| = \langle\varphi|A^{+}$

notar: $\langle\psi|\left(A^{+}|\varphi\rangle\right) = \left(\left(\langle\psi|A^{+}\right)|\varphi\rangle\right)^{*} = \langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right)$, (250.2)

p/ $\forall$ $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$

temos que : $\langle \psi | (A^\dagger | \varphi \rangle) = \langle \varphi | (A | \psi \rangle)$ p/ op. A antilinear

e Eq. (21.2) : $\langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^*$ " " " linear

· propriedades $A^\dagger$: similar propriedades ops. lineares

· se op. antilinear A é tal que $A^\dagger = A^{-1}$
↳ A é op. anti-unitário : $AA^\dagger = A^\dagger A = 1$ (251.1)

· transformações anti-unitárias,
p/ uma transf. anti-unitária $\mathcal{K}$ ~ associado op. anti-unitário K ;

temos que :

$|\hat{u}\rangle = K|u\rangle$, p/ $\forall$ $|u\rangle \in \mathcal{E}$

$\langle \hat{v}| = \langle v | K^\dagger$, p/ $\forall$ $\langle v| \in \mathcal{E}^*$

$\hat{B} = K B K^\dagger$, p/ op. linear B ~ espaço $\mathcal{E}$

propriedades :

(i) se $B|b\rangle = b|b\rangle \rightarrow KBK^\dagger(K|b\rangle) = b(K|b\rangle)$
↳ $\hat{B}|\hat{b}\rangle = b|\hat{b}\rangle$,

i.e., K preserva espectro observável B.

(ii) produto escalar se transforma no c.c.,

$$- \langle \hat{u} | \hat{B} | \hat{v} \rangle = (\langle u | K^\dagger)(KBK^\dagger)(K|v\rangle) = (\langle u | K^\dagger)(KB\underbrace{K^\dagger K}_{1}|v\rangle)$$

$$= \left((\langle u | \underbrace{K^\dagger K}_{1} B) |v\rangle \right)^* = \langle u | B | v \rangle^*$$

(251.2)

$$- \langle \hat{u} | \hat{v} \rangle = (\langle u | K^\dagger)(K|v\rangle) = (\langle u | (\underbrace{K^\dagger K}_{1} |v\rangle))^* = \langle u | v \rangle^* \; :$$

: comparar teorema (248.2)

(iii) "transformação" da constante,

Eq. (249.1) : $\lambda^* K = K\lambda \rightarrow K\lambda K^+ = \lambda^*$ (252.1)

(iv) transformação álgebra operadores,

Ex.: $[q,p] = i\hbar \xrightarrow{\text{VERIFICAR}} [\hat{q},\hat{p}] = -i\hbar$

(252.2)

$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \xrightarrow{\text{VERIFICAR}} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = -i\hbar \hat{J}_z$

· operador conjugação complexa K_A,
considerar: observável $A|n\rangle = a_n|n\rangle$ e
op. antilinear K_A tal que

$K_A|n\rangle = |n\rangle$ (252.3)

notar:

(1) $K_A^2|n\rangle = K_A|n\rangle = |n\rangle$,
como $|n\rangle$ vetor base $\mathcal{E}$ $\rightarrow K_A^2 = 1$

(2) $\langle n|K_A^+ = \langle n| \rightarrow \langle n|n\rangle = (\langle n|K_A^+)(K_A|n\rangle)$

$= (\langle n|(K_A^+ K_A|n\rangle))^* = (\langle n|(K_A^+ K_A)|n\rangle)^*$

como $|n\rangle$ vetor base $\mathcal{E}$ $\rightarrow K_A^+ K_A = 1$
↳ $K_A^+ K_A^2 = K_A \rightarrow K_A^+ = K_A = K_A^{-1}$

↳ K_A : op. anti-unitário

(3) p/ $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$,

$K_A|\psi\rangle = K_A \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n K_A(\langle n|\psi\rangle|n\rangle) = \sum_n \langle n|\psi\rangle^* |n\rangle$

(4) p/ observável B,

$$\langle m | (K_A B K_A^\dagger) | n \rangle = \langle m | (K_A B K_A) | n \rangle =$$

$$= \Big(\underbrace{(\langle m | K_A)}_{\langle m |} \underbrace{(B K_A | n \rangle)}_{B (K_A | n \rangle)} \Big)^* = \langle m | B | n \rangle^*$$

↑ op. linear

↳ props. (3) e (4): matrizes representação $\xrightarrow{K_A}$ c.c.
associada ao obs. A

Obs.: notar que o op. conjugação depende da representação!

· inversão temporal: mecânicas clássica e quântica,
hipótese: sistema conservativo,

- Mecânica clássica: considerar sistema descrito pela
hamiltoniana:

$$H_C(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

verifica-se que: se $\vec{r}(t)$: solução eq. de movimento
↳ $\vec{r}_{REV}(t) = \vec{r}(-t)$: " " " " .

Lembrar: sob inversão temporal $t \to -t$, temos que
$\vec{p} \to -\vec{p}$: Eq. (247.1)
↳ $H_C(-\vec{p}, \vec{r}) = H_C(\vec{p}, \vec{r})$! (253.1)

como $\vec{p} \to -\vec{p}$, temos que $\vec{p}_{REV}(t) = -\vec{p}(-t)$

- Mecânica quântica: eq. de Schrödinger p/ sistema
quântico análogo:

$$i\hbar\, \partial_t \psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \qquad (254.1)$$

sob inversão temporal,

$$t \to -t : \quad -i\hbar\, \partial_t \psi(\vec{r},-t) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},-t)$$

hipótese : $V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$

$$\text{c.c.} : \quad i\hbar\, \partial_t \psi^*(\vec{r},-t) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi^*(r,-t) \qquad (254.2)$$

notar : se $\psi(\vec{r},t)$: sol. eq. de Schrödinger (245.1)
↳ $\psi_{REV}(\vec{r},t) = \psi^*(\vec{r},-t)$: " " " " !

· operador de inversão temporal (partícula s/ spin)

similar comportamento vetores (usuais) sob $t \to -t$,
Eq. (247.1), podemos definir o op. de inversão temporal Θ:

$$\Theta \vec{r}\, \Theta^\dagger = \vec{r}$$
$$\Theta \vec{p}\, \Theta^\dagger = -\vec{p} \qquad (254.3)$$
$$\Theta \vec{J}\, \Theta^\dagger = -\vec{J}$$

como $[r_i, p_i] = i\hbar$
↳ $\Theta [r_i, p_i] \Theta^\dagger = -[r_i, p_i] = \Theta (i\hbar) \Theta^\dagger = -i\hbar$ — condição p/ preservar álgebra
↳ Θ : op. anti-unitário

Obs. : Eq. (254.3) : postulados !

considerar a representação de coordenadas;
nesse caso (veja pg. 86) : $\langle \vec{r}'|\vec{r}|\vec{r}''\rangle = \vec{r}''\, \delta(\vec{r}'-\vec{r}'')$
$$\langle \vec{r}'|\vec{p}|\vec{r}''\rangle = -i\hbar \vec{\nabla}'\, \delta(\vec{r}'-\vec{r}'') \qquad (254.4)$$

Eqs. (254.3) e (254.4) são consistentes se

$\Theta = K_0$: op. de conjugação complexa (252.3)
associado à rep. de coordenadas (255.1)

p/ estado $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$,

$$\Theta|\psi\rangle = \Theta \int d^3r' \, |\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\psi\rangle = \int d^3r' \, \underbrace{\Theta\left(\psi(\vec{r}\,')\,|\vec{r}\,'\rangle\right)}_{\psi^*(\vec{r}\,')\,\underbrace{K_0|\vec{r}\,'\rangle}_{|\vec{r}\,'\rangle}}$$

$$= \int d^3r' \, \psi^*(\vec{r}\,')\,|\vec{r}\,'\rangle$$

(255.2)

$\hookrightarrow \langle\vec{r}|\Theta|\psi\rangle = \Theta\psi(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})$

· Obs.: verifica-se que se K_p : op. de conjugação complexa associado à rep. de momento $\to K_0 = \pi K_p$
(veja P 15.10, Messiah)

· hipótese : H invariante sob inversão temporal
$\hookrightarrow [\Theta, H] = 0$: cuidado significado!

Eq. de Schrödinger (73.1) :

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$$

$$\Theta : \quad -i\hbar \frac{d}{dt}\left(\Theta|\psi(t)\rangle\right) = \Theta\left(H|\psi(t)\rangle\right) = H\left(\Theta|\psi(t)\rangle\right)$$

$$t \to -t : \quad i\hbar \frac{d}{dt}\left(\Theta|\psi(-t)\rangle\right) = H\left(\Theta|\psi(-t)\rangle\right) \qquad (255.3)$$

se $|\psi(t)\rangle$: sol. eq. de Schrodinger
$\hookrightarrow |\psi(t)\rangle_{REV} = \Theta|\psi(-t)\rangle$: " " " " .

notar : $\langle \vec{r} | \Theta | \psi(-t) \rangle = \psi^*(\vec{r}, -t)$: ok c/ (254.2)

Obs. : $[H, \Theta] = 0 \not\rightarrow \Theta$ é uma cte de movimento pois Eq. (76.1) ok apenas p/ ops. lineares

· considerar translação infinitesimal $\vec{\epsilon}$, Eq. (232.2),

$[\Theta, T(\vec{\epsilon})] = [\Theta, 1 - i\vec{\epsilon}\cdot\vec{p}/\hbar] = \sum_j \frac{\epsilon_j}{\hbar} [\Theta, -ip_j] = 0$, pois

$[\Theta, -ip_j] = \Theta(-ip_j) - (-ip_j)\Theta = i\Theta p_j + ip_j\Theta = 0$;
↑ Eq. (254.3)

similar p/ rotação infinitesimal, verifica-se que
$[\Theta, U_{\hat{n}}(\epsilon)] = 0$;

de fato, temos que $[\Theta, T(\vec{a})] = [\Theta, U(R)] = [\Theta, \pi] = 0$ (256.1)
(veja P 15.8, Messiah)

· op. inversão temporal (partícula c/ spin)

Eq. (254.3) p/ $\vec{J} = \vec{S}$: $\Theta\vec{S}\Theta^{-1} = -\vec{S}$: op. inversão temporal inverte spin!

considerar : K_0 : op. de conjugação complexa associado à base $|\vec{r}\sigma\rangle = |\vec{r}\rangle|sm\rangle$
onde $S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle$

Lembrar P 13.2, Messiah :
se representação ops. J_x e J_z : matrizes $\mathbb{R}$
↳ " op. J_y : " imaginária pura

temos que : $K_0\vec{r}K_0 = \vec{r}$ $K_0\vec{p}K_0 = -\vec{p}$
$K_0 S_x K_0 = +S_x$ $K_0 S_y K_0 = -S_y$ (256.2)
$K_0 S_z K_0 = +S_z$

podemos definir: op. unitário, veja Eq. (249.2)

$$\Theta = Y K_0 \qquad (257.1)$$

ops. anti-unitários

como: $\Theta \vec{r} \Theta^{\dagger} = \vec{r} \rightarrow Y K_0 \vec{r} K_0 Y^{\dagger} = Y \vec{r} Y^{\dagger} = \vec{r}$

$\Theta \vec{p} \Theta^{\dagger} = -\vec{p} \rightarrow Y K_0 \vec{p} K_0 Y^{\dagger} = -Y \vec{p} Y = -\vec{p}$

$\Theta S_\alpha \Theta^{\dagger} = -S_\alpha \rightarrow Y K_0 S_\alpha K_0 Y^{\dagger} = Y S_\alpha Y^{\dagger} = -S_\alpha \quad ; \quad \alpha = x, z$

$\Theta S_y \Theta^{\dagger} = -S_y \rightarrow Y K_0 S_y K_0 Y^{\dagger} = -Y S_y Y^{\dagger} = -S_y$,

temos que: $Y \vec{r} Y^{\dagger} = \vec{r} \qquad Y \vec{p} Y^{\dagger} = \vec{p}$

$$Y S_x Y^{\dagger} = -S_x \qquad (257.2)$$

$Y S_y Y^{\dagger} = +S_y \qquad Y S_z Y^{\dagger} = -S_z$:

: definição op. unitário Y.

notar: op. Y modifica apenas as componentes do op. de spin; de fato, op. Y similar op. rotação spin

$\theta = \pi$ w.r.t. eixo y

$$\hookrightarrow Y = e^{-i\pi S_y/\hbar} \qquad (257.3)$$

Eq. (257.1) $\rightarrow \Theta = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0$: op. inversão inversão temporal (partícula c/ spin)

(257.4)

em particular, p/ spin-1/2,

Eq. (187.4) : $e^{-i\pi S_y/\hbar} = e^{-i\pi \sigma_y/2} = \hat{1} \cos\pi/2 - i\sigma_y \sin\pi/2$

$\hookrightarrow \Theta = -i\sigma_y K_0$: op. inversão temporal p/ partícula spin 1/2 (257.5)

· sobre op. Θ^2,

como duas inversões temporais sucessivas não alteram o sistema, temos que

$$\Theta^2 |\psi\rangle = c|\psi\rangle \quad , \quad c \in \mathbb{C} \ \text{e} \ |c| = 1 \qquad (258.1)$$

notar:

· $\Theta^3|\psi\rangle = \Theta(\Theta^2|\psi\rangle) = \Theta(c|\psi\rangle) = c^*(\Theta|\psi\rangle)$

· $\Theta^2(|\psi\rangle + \Theta|\psi\rangle) \overset{\text{Eq. (258.1)}}{=} c'(|\psi\rangle + \Theta|\psi\rangle)$

$$= c|\psi\rangle + c^*(\Theta|\psi\rangle) = c\left(|\psi\rangle + \frac{c^*}{c}\Theta|\psi\rangle\right)$$

↳ $c = c^* = c'$ ⊕ $|c| = |c'| = 1 \ \to \ c = \pm 1$: depende da natureza do sistema!

temos que,

$$\Theta^2|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle \qquad (258.2)$$

Eq. (257.3) : $\Theta^2 = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0 \underbrace{e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0}_{e^{+i\pi(-S_y)/\hbar}} = e^{-2\pi i S_y/\hbar}$

Como $[S_y, L_y] = 0$ e $e^{-2\pi i L_y/\hbar} = 1$, podemos escrever

$$\Theta^2 = e^{-2\pi i J_y/\hbar} = U_y(\theta = 2\pi) \ ; \quad J_y = L_y + S_y \qquad (258.3)$$

Ex.: autovetores ops. J^2 e J_z,

Lembrar Eq. (153.1) : $Y_\ell^m(\theta,\varphi)^* = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\theta,\varphi)$

↳ $\langle \vec{n}|\Theta|\ell m\rangle = \langle \hat{n}|\Theta|\ell m\rangle = \Theta Y_\ell^m(\theta,\varphi) = K_0 Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

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

tilibra

↳ $\Theta|\ell m\rangle = (-1)^m |\ell, -m\rangle$ (259.1)

caso geral: como $\Theta J_z \Theta^\dagger = -J_z \rightarrow J_z\Theta = -\Theta J_z$

↳ $J_z(\Theta|jm\rangle) = -\Theta J_z|jm\rangle = -\Theta(m\hbar|jm\rangle) = -m\hbar(\Theta|jm\rangle)$

↳ $\Theta|jm\rangle \propto |j,-m\rangle \xrightarrow{\text{Eq. (259.1)}} \Theta|jm\rangle = e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$

↳ $\delta = \delta(j)$

- p/ j inteiro,

$\Theta^2|jm\rangle = \Theta\left(e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle\right) = e^{-i\delta}(-1)^m \cdot e^{i\delta}(-1)^{-m}|jm\rangle = |jm\rangle$

- p/ j semi-inteiro,

como $(-1)^m = (i)^{2m}$

↳ $\Theta^2|jm\rangle = \Theta\left(e^{i\delta}(i)^{2m}|j,-m\rangle\right) = e^{-i\delta}(-i)^{2m} \cdot e^{i\delta}(i)^{-2m}|jm\rangle$

$= (-i\cdot(-i))^{2m}|jm\rangle = -|jm\rangle$, p/ m: semi-inteiro

em resumo:

$\Theta|jm\rangle = e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$; $\delta = \delta(j)$

(259.2)

$\Theta^2|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle$: OK c/ Eq. (258.3)

· inversão temporal e conjugação complexa,

devido à similaridade entre Θ e c.c.

↳ definição: se A e B ops. lineares tais que

$\Theta A \Theta^\dagger = B$ (259.3)

↳ op. A complexo conjugado op. B (e vice-versa) em particular,

se $\Theta A \Theta^{\dagger} = +A$: op. A é um op. real (260.1)

se $\Theta B \Theta^{\dagger} = -B$: op. B é um op. imaginário puro

* importante: conceito complexo conjugado (259.3) $\neq$ conceito op. adjunto (hermitiano conjugado)

· similar, podemos definir:

$\Theta|\psi\rangle$: vetor complexo conjugado vetor $|\psi\rangle$ (260.2)

notar ("VOLTA")

$|\psi\rangle$: " " " " $\Theta|\psi\rangle$,

somente se $\Theta^2 = +1$!

· notar:

(i) $\Theta^2 = 1$; nesse caso, "VOLTA" (260.2) OK

↳ é possível definir um vetor $\mathbb{R}$

· definição: se $|\psi\rangle$ é tal que $\Theta|\psi\rangle = |\psi\rangle$

↳ $|\psi\rangle$ é um vetor real (260.3)

verifica-se que é possível construir uma base formada por vetores reais (de acordo c/ critério (260.3)) p/ espaço vetorial $\mathcal{E}$.

(ii) $\Theta^2 = +1$; nesse caso, não é possível definir vetor $\mathbb{R}$;

como $\Theta^2 = -1 \rightarrow \Theta^{\dagger} = -\Theta$;

Eq. (250.2)

notar: $\langle\psi|\left(\Theta|\psi\rangle\right) = \langle\psi|\left(\Theta^{\dagger}|\psi\rangle\right) = -\langle\psi|\left(\Theta|\psi\rangle\right) = 0$

↳ $|\psi\rangle$ e seu c.c. $\Theta|\psi\rangle$ são $\perp$ (260.4)

· Degenerescência de Kramers.

hipótese: $[H, \Theta] = 0$

se $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

↳ $\Theta(H|\psi\rangle) = H(\Theta|\psi\rangle) = \Theta(E|\psi\rangle) = E(\Theta|\psi\rangle)$

notar: subespaço $\mathcal{E}_E$ do autovetor E é invariante w.r.t. Θ;
nesse caso, temos 2 possibilidades

(i) $|\psi\rangle \propto \Theta|\psi\rangle$: linearmente dependentes
(ii) $|\psi\rangle \not\propto \Theta|\psi\rangle$: " independentes

se (i) ok → $\Theta|\psi\rangle = a|\psi\rangle$; $|a| = 1$
↳ $\Theta^2|\psi\rangle = \Theta(a|\psi\rangle) = a^*\Theta|\psi\rangle = |a|\,|\psi\rangle$,
i.e. (i) ok somente se $\Theta^2 = +1$.

se $\Theta^2 = -1 \xrightarrow{\text{Eq. (260.4)}} |\psi\rangle$ e $\Theta|\psi\rangle$ são $\not\propto$
↳ autovalor E é, no mínimo, duplamente
degenerado: degenerescência de Kramers (261.2)

Ex.: sistema c/ número impar spins $s = 1/2$;
em geral, (261.2) ~ degenerescência entre estados
spin up e spin down.

⊕ $\vec{B}_{ext}$: remover degenerescência!

considerar sistema sob campos elétrico e magnético:

$$H = H_0 \to H_0 + \alpha \vec{A}\cdot\vec{p} + \gamma \vec{S}\cdot\vec{B} + q\phi(\vec{r}) :$$

: veja Eq. (131.5)

notar: $[\Theta, \phi(\vec{r})] = 0$, pois $\phi(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ e $[\Theta, \vec{r}] = 0$

$[\Theta, \vec{S}\cdot\vec{B}] \neq 0$, pois $[\Theta, \vec{S}] \neq 0$
(nesse caso, $\vec{B}$: parâmetro externo)

$[\Theta, \vec{A}\cdot\vec{p}] \neq 0$, pois $[\Theta, \vec{p}] \neq 0$

Ex.: ops. tensoriais esféricos,

se $\Theta T^{(k)}_q \Theta^\dagger = \pm(-1)^q T^{(k)}_{-q}$

(262.1)

↳ $T^{(k)}_q$: par sob inversão temporal : +
: ímpar " " " : −

verifica-se que:

$$\langle \alpha' j' m' | T^{(k)}_q | \alpha j m \rangle = \pm e^{i(\delta-\delta')} \langle \alpha' j', -m' | T^{(k)}_{-q} | \alpha j, -m \rangle^*$$

⊕ teorema de Wigner-Eckart (215.2):

$$\underbrace{\langle \alpha j \| T^{(k)} \| \alpha j \rangle}_{(*)} = \pm(-1)^k \langle \alpha j \| T^{(k)} \| \alpha j \rangle^*$$

hipótese: $(*) \in \mathbb{R}$

↳ $(*) = 0$ se (i) $T^{(k)}$ par sob Θ e k ímpar
(ii) " ímpar " " " k par.

Lembrar Eq. (246.2): momento de dipolo elétrico

$\vec{d} = \sum_j q_j r_j \xrightarrow{\text{Eq. (254.3)}} \vec{d}$ é par sob Θ

além disso, $\vec{d}$ é um op. vetorial $\rightarrow$ $k=1$

$\hookrightarrow$ $\langle \alpha j m | \vec{d} | \alpha j m \rangle = 0$ devido invariância temporal
se $|\alpha j m\rangle$: estado estacionário
do sistema

Lembrar: $\langle \psi | \vec{d} | \psi \rangle = 0$, p/ autovalor E não-degenerado,
$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ e
$|\psi\rangle$ c/ paridade definida.

· Invariância de gauge (calibre),
(p/ detalhes veja Cap. 6, Desai)

· Lembrar EM: campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ em termos potenciais
escalar Φ e vetor $\vec{A}$ (sistema gaussiano):

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A} \quad \text{e} \quad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} \qquad (263.1)$$

onde $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r},t)$, $\vec{B} = \vec{B}(\vec{r},t)$, $\Phi = \Phi(\vec{r},t)$ e $\vec{A} = \vec{A}(\vec{r},t)$

Eqs. de Maxwell invariantes sob transformação de gauge:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$$
$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\partial_t \chi \qquad (263.2)$$

onde $\chi = \chi(\vec{r},t)$: função arbitrária

· eq. de movimento partícula massa m, carga q sob
campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$:

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = q\left(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v}\times\vec{B}\right) \qquad (263.3)$$

como (263.3) invariante sob transf. gauge (263.2)

↳ $\vec{r}(t)$ e $\vec{v}(t)$: " " " " " !

· momento canonicamento conjugado, Eq. (131.4),

$$\vec{p} = m\vec{v} + \frac{1}{c} q \vec{A}$$

· Mecânica quântica : H p/ partícula massa m, carga q sob campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$, Eq. (131.5) :

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}\right)^2 + q\Phi, \qquad (264.1)$$

$\vec{p}$: op. momento

$\Phi = \Phi(\vec{r},t)$ e $\vec{A} = \vec{A}(\vec{r},t)$: ops. (versão de Schrödinger)

$\vec{v} = \frac{1}{m}\left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}\right)$: op. velocidade : Eq. (132.1)

álgebra : $[r_i, v_j] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{ij}$ e $[v_i, v_j] = \frac{i\hbar}{m^2 c} q \epsilon_{ijk} v_k$

· inicial : eq. de movimento op. velocidade (versão de Heisenberg),

Eq. (80.1) : $i\hbar \frac{d\vec{v}_H}{dt} = [\vec{v}_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial \vec{v}_H}{\partial t}$

$$[\vec{v}_H, H_H] = U^+ [\vec{v}, H] U$$

como $[v_i, H] = [v_i, \frac{1}{2} m \vec{v}\cdot\vec{v} + q\Phi]$

$$= \frac{1}{2} m \sum_j [v_i, v_j^2] + q[v_i, \Phi(\vec{r},t)]$$

$\cdot\ [v_i, v_j^2] = [v_i, v_j]v_j + v_j[v_i, v_j] = \frac{i\hbar q}{m^2 c} \epsilon_{ijk}(B_k v_j + v_j B_k)$

$= \frac{i\hbar}{m^2 c} q\, \epsilon_{ijk}(v_j B_k - B_j v_k)$

$\cdot\ [v_i, \Phi] = \frac{1}{m}[p_i, \Phi] = \frac{1}{m}\partial_i \Phi\, [p_i, r_i] = -\frac{i\hbar}{m}\partial_i \Phi$

temos que (verificar):

$$m\frac{d\vec{v}_H}{dt} = \frac{1}{2c} q(\vec{v}_H \times \vec{B} - \vec{B}\times\vec{v}_H) + q\underbrace{\left(-\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A}\right)}_{\vec{E}} : \quad (265.1)$$

: versão M.Q. eq. de movimento (263.3)

· sobre a invariância de gauge.

· Eq. (264.1): hamiltoniano partícula no gauge $(\Phi, \vec{A})$

· similar, temos que

$$H' = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{1}{c}q\vec{A}') + q\Phi' : \quad (265.2)$$

: hamiltoniano partícula no gauge $(\Phi', \vec{A}')$

· conjuntos $(\Phi, \vec{A})$ e $(\Phi', \vec{A}')$ relacionados via a transf. de gauge (263.2).

notar Eqs. (264.1) e (265.2) : H invariante sob transf. gauge!

· próxima etapa: determinar op. unitário U_x correspondente

considerar $|\psi'\rangle = U_x|\psi\rangle$

como mec. clássica : $\vec{r}(t)$ e $\vec{v}(t)$ independente escolha do gauge, similar condição (231.2), temos que

$$\langle \psi' | \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \psi | U_\chi^\dagger \vec{r}\, U_\chi | \psi \rangle = \langle \psi | \vec{r} | \psi \rangle$$

condição

$$\langle \psi' | \vec{v} | \psi' \rangle = \langle \psi | U_\chi^\dagger \left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}' \right) U_\chi | \psi \rangle = \langle \psi | \vec{v} | \psi \rangle$$

notar: $\vec{A}'$!

$$= \langle \psi | \left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A} \right) | \psi \rangle ;$$

temos que,

$$\cdot\ U_\chi \vec{r}\, U_\chi^\dagger = \vec{r} \qquad (266.1)$$

$$\cdot\ U_\chi \left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A} \right) U_\chi^\dagger = \vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}' \qquad (266.2)$$

$$\text{ou } U_\chi \vec{p}\, U_\chi^\dagger = \vec{p} - \frac{1}{c} q \underbrace{\left(\vec{A}' - \overbrace{U_\chi \vec{A}\, U_\chi^\dagger}^{\vec{A}} \right)}_{\vec{A}' - \vec{A} = \vec{\nabla}\chi} = \vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{\nabla} \chi$$

Eqs. (266.1) e (266.2) : definição op. unitário U_χ

notar: Eq. (266.1) $\to$ $U_\chi = U_\chi(\vec{r}, t)$

$\hookrightarrow$ $U_\chi \Phi U_\chi^\dagger = \Phi(\vec{r}, t)$ e $U_\chi \vec{A} U_\chi^\dagger = \vec{A}(\vec{r}, t)$

como $U_\chi = U_\chi(\vec{r}, t)$ e U_χ : op. unitário, podemos escrever

$$U_\chi = e^{iF(\vec{r}, t)}$$

dessa forma,

$$U_\chi p_j U_\chi^\dagger = e^{iF} p_j e^{-iF_j}$$

$$= p_j + \underbrace{[iF, p_j]}_{-i[p_j, F] = -\hbar \partial_i F} + \frac{1}{2!} \underbrace{[iF, [iF, p_j]]}_{0} + \dots$$

$$\hookrightarrow U_\chi \vec{p} U_\chi^\dagger = \vec{p} - \hbar \vec{\nabla} F \xrightarrow{\text{Eq. (266.2)}} F(\vec{r}, t) = \frac{1}{\hbar c} q \chi(\vec{r}, t)$$

$$\hookrightarrow U_\chi = \exp\left(iq\chi / \hbar c \right) \qquad (267.1)$$

· vamos verificar que a eq. de Schrödinger é invariante sob uma transf. de gauge.

$$\text{Eq. (73.1)}: \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

$$\hookrightarrow i\hbar U_\chi \frac{d|\psi\rangle}{dt} = U_\chi H U_\chi^\dagger U_\chi |\psi(t)\rangle$$

$$\text{como } \frac{d}{dt}(U_\chi |\psi\rangle) = \frac{dU_\chi}{dt} |\psi\rangle + U_\chi \frac{d|\psi\rangle}{dt}$$

$$\hookrightarrow \frac{d}{dt} \underbrace{(U_\chi |\psi\rangle)}_{|\psi'\rangle} = \underbrace{\left(U_\chi H U_\chi^\dagger + i\hbar \frac{dU_\chi}{dt} U_\chi^\dagger \right)}_{H'} (U_\chi |\psi\rangle) \qquad (267.2)$$

de fato, temos que

$$\cdot\ U_\chi H U_\chi^\dagger = \frac{1}{2m} \underbrace{U_\chi \left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A} \right) U_\chi^\dagger}_{\overset{\text{Eq. (266.2)}}{=} \vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}'} U_\chi \left(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A} \right) U_\chi^\dagger + \underbrace{q U_\chi \Phi U_\chi^\dagger}_{q\Phi}$$

$$\cdot\ i\hbar \left(\frac{dU_\chi}{dt} \right) U_\chi^\dagger = i\hbar \left(\frac{iq}{\hbar c} \right) (\partial_t \chi) U_\chi U_\chi^\dagger = -\frac{1}{c} q \partial_t \chi$$

$$\hookrightarrow H' = \text{Eq. (265.2)}$$

· em particular, na rep. de coordenadas,

Eq. (73.1) ⊕ hamiltoniano (264.1) :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = i\hbar \partial_t \psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | H | \psi(t) \rangle$$

$$\hookrightarrow i\hbar \partial_t \psi(\vec{r},t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{1}{c} q \vec{A} \right)^2 \psi(\vec{r},t) + q \Phi \psi(\vec{r},t) \tag{268.1}$$

similar, Eq. (267.2) ⊕ hamiltoniano (265.2):

$$i\hbar \partial_t \psi'(\vec{r},t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{1}{c} q \vec{A}' \right)^2 \psi'(\vec{r},t) + q \Phi' \psi'(\vec{r},t) \tag{268.2}$$

Eqs. (268.1) e (268.2) relacionadas via a transf. de gauge:

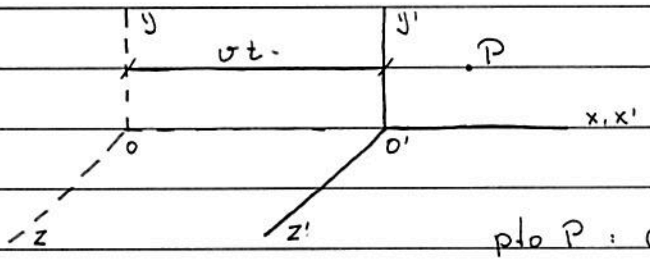
$$\begin{aligned} \vec{A} &\to \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \\ \Phi &\to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \partial_t \chi \end{aligned} \tag{268.3}$$

$$\psi(\vec{r},t) \to \psi'(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | U_\chi | \psi(t) \rangle = e^{iq\chi/\hbar c} \psi(\vec{r},t),$$

i.e., sob uma transf. de gauge a fase da função de onda é modificada!

· Transformação de Galileu. (p/ detalhes veja Sec. 3.4, Ballentine)
ideia: estudar a invariância do sistema sob uma transformação de Galileu.

· Lembrar: mecânica clássica.



$\vec{v} = v\hat{x}$: velocidade REF K' w.r.t. REF K

pto P : (x, y, z) : coordenadas REF K
(x', y', z') : " " K'

hipótese: origem O = origem O' p/ $t = t' = 0$

temos que:

$$x' = x - vt$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$t' = t$$

: transf. de Galileu
(transf. passiva)

ou, p/ uma transf. ativa:

$$x' = x + vt$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$t' = t$$

↳ caso geral, $\vec{v}$: velocidade REF K' w.r.t. REF K
e eixos $\hat{e}_i \parallel \hat{e}'_i$, temos que

$$\vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{v}t$$
$$t' = t \qquad (269.1)$$

· mecânica quântica.
p/ transf. de Galileu (ativa) ~ associado op. unitário
$U(\vec{v})$
↑ parâmetro

· notação : $\vec{r}(t) = \vec{r}_H(t)$ e $\vec{V}(t) = \vec{V}_H(t)$

· notar : $\vec{V}(t)$: op. velocidade ; $\vec{\vartheta}$: parâmetro da transf.

se $|\psi'\rangle = U(\vec{\vartheta})|\psi\rangle$

↳ $\langle\psi'|\vec{r}(t)|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(\vec{\vartheta})\,\vec{r}(t)\,U(\vec{\vartheta})|\psi\rangle = \langle\psi|\vec{r}(t)|\psi\rangle + \vec{\vartheta}t$

condição ~ Eq. (269.1)

como $|\psi\rangle$ é arbitrário, temos que

$$U^\dagger(\vec{\vartheta})\,\vec{r}(t)\,U(\vec{\vartheta}) = \vec{r}(t) + \vec{\vartheta}t$$

ou $U(\vec{\vartheta})\,\vec{r}(t)\,U^\dagger(\vec{\vartheta}) = \vec{r}(t) - \vec{\vartheta}t$ (270.1)

$\frac{d}{dt}$: $U(\vec{\vartheta})\,\vec{V}(t)\,U^\dagger(\vec{\vartheta}) = \vec{V}(t) - \vec{\vartheta}$ (270.2)

$m\frac{d}{dt}$: $U(\vec{\vartheta})\,\vec{p}(t)\,U^\dagger(\vec{\vartheta}) = \vec{p}(t) - m\vec{\vartheta}$ (270.3)

nesse caso :

· $\vec{V}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}(t), H_H]$: eq. de Heisenberg (80.1)

e

· $\vec{p}(t) = m\vec{V}(t)$ (270.4)

· considerar, caso particular, $t=0$: transf. instântanea de Galileu,

nesse caso : $\vec{r}(t=0) = \vec{r}_H(t=0) = \vec{r}_S = \vec{r}$

$\vec{V}(t=0) = \vec{V}_H(t=0) = \vec{V}_S = \vec{V}$

Eqs. (270.1) - (270.3) :

$U(\vec{\upsilon})\,\vec{r}\,U^{\dagger}(\vec{\upsilon}) = \vec{r}$

$U(\vec{\upsilon})\,\vec{V}\,U^{\dagger}(\vec{\upsilon}) = \vec{V} + \vec{\upsilon}$ (271.1)

$U(\vec{\upsilon})\,\vec{p}\,U^{\dagger}(\vec{\upsilon}) = \vec{p} - m\vec{\upsilon}$

considerar uma tranf. infinitesimal, i.e., $\upsilon << 1$; podemos escrever.

$$U(\vec{\upsilon}) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\vec{\upsilon}\cdot\vec{G} + O(\upsilon^2) \qquad (271.2)$$

op. hermitiano, gerador de boost

notar:

$$U(\vec{\upsilon})\,\vec{p}\,U^{\dagger}(\vec{\upsilon}) = \vec{p} - m\vec{\upsilon}$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\upsilon_k G_k\right) p_j \left(1 + \frac{i}{\hbar}\upsilon_k G_k\right) \simeq p_j - m\upsilon_j$$

$$p_j - \frac{i}{\hbar}[\upsilon_k G_k, p_j] + O(\upsilon^2) \simeq p_j - m\upsilon_j$$

$$\hookrightarrow \sum_k \upsilon_k [G_k, p_j] = -i\hbar m\,\upsilon_j$$

$$\hookrightarrow [G_k, p_j] = -i\hbar m\,\delta_{kj} \quad \text{ou} \quad [G_i, p_j] = -i\hbar m\,\delta_{ij}$$

similar (verificar): $[G_i, r_j] = 0$ e $[G_i, V_j] = -i\hbar\,\delta_{ij}$

· como $U(\vec{\upsilon}_1)U(\vec{\upsilon}_2) = U(\vec{\upsilon}_1 + \vec{\upsilon}_2) \rightarrow [G_i, G_j] = 0$

Resumo: álgebra gerador $\vec{G}$

$$[G_i, G_j] = 0$$
$$[G_i, r_j] = 0 \qquad (t=0)$$
$$[G_i, V_j] = -i\hbar\,\delta_{ij} \qquad (271.3)$$
$$[G_i, p_j] = -im\hbar\,\delta_{ij}$$

massa partícula e $\vec{p} = m\vec{V}$

notar Eq. (271.1): op. $\vec{G}$ é um gerador de translações de velocidade;

comparar c/ Eq. (231.2) p/ translações espaciais!

· p/ uma transf. finita $\vec{v}$.

$$\xrightarrow{\text{Eq. (271.2)}} \quad U(\vec{v}) = e^{-i\vec{v}\cdot\vec{G}/\hbar}, \quad \text{p/ } t=0 \tag{272.1}$$

· próxima etapa: verificar que

$$\vec{G} = -m\vec{r} \tag{272.2}$$

· vamos considerar 2 casos.

(1) partícula livre s/ spin.

Eqs. (271.3) e (272.2) :

$$[G_i + mr_i, r_j] = 0$$
$$[G_i + mr_i, p_j] = 0 \tag{272.3}$$

verifica-se que:

se op. O é tal que $[O, r_i] = 0 \rightarrow O \neq O(\vec{p})$

" " " " " " $[O, p_j] = 0 \rightarrow O \neq O(\vec{r})$

↳ se as duas condições OK ⊕ partícula s/ spin → $O = \lambda \hat{I}$

$$\text{Eq. (272.3)} \longrightarrow G_i = -mr_i + \underbrace{c_i}_{\text{CTE} \in \mathbb{C}} \hat{I}$$

notar: $[G_i, L_j] = \epsilon_{jkm}[G_i, r_k p_m] = -im\hbar\, \epsilon_{jki} r_k$

$$\text{ou } [G_i, L_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk}(-mr_k) \tag{272.4}$$

se $c_i = 0 \to \vec{G} = -m\vec{r}$ e $\vec{G}$ é um op. vetorial

(comparar Eqs. (165.1) e (272.4)

e lembrar que, nesse caso, $\vec{J} = \vec{L}$)

· sobre a forma do hamiltoniano H, invariante sob transf. de Galileu.

verifica-se que (veja pg. 276) : $[\vec{G}, H] = -i\hbar\vec{p}$ (273.1)

⊕ Eq. (272.2) : $[r_j, H] = \frac{i\hbar}{m} p_j$ (273.2)

↳ em princípio : $H = \frac{p^2}{2m}$

notar:

· $[H - p^2/2m, p_i] = [H, p_i] = 0$, pois partícula livre invariante sob translação espacial

e

· $[H - p^2/2m, r_i] = 0$ ← Eq. (273.2)

↳ $H - p^2/2m \propto 1$ ou $H = E_0 + \frac{p^2}{2m}$: (273.3)

∴ H p/ partícula livre é invariante sob transf. de Galileu

notar : $[r_j, H] = [r_j, E_0 + p^2/2m] = [r_j, p^2/2m] = \frac{i\hbar}{m} p_j$

↳ eq. de Heisenberg (80.1) :

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}(t), H_H] = \frac{1}{m}\vec{p}(t)$$: consistente c/ Eq. (270.4)

(2) partícula s/ spin ⊕ potencial externo,

nesse caso : $\vec{v}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}(t), H_H]$: ok ; (274.1)

$[G_i, r_j] = 0$ e $[G_i, v_j] = -i\hbar\,\delta_{ij}$: ok ; (274.2)

mas, em princípio, $\vec{p}(t) \neq m\vec{v}$

· hipótese : Eq. (272.2) : ok e álgebra (271.3) : ok

- sobre op. velocidade $\vec{v}$,

$$\cdot\ [v_i - p_i/m, G_j] = \underbrace{[v_i, G_j]}_{= i\hbar\delta_{ij}} - \underbrace{[p_i/m, G_j]}_{= i\hbar\delta_{ij}} = 0$$

↑ Eq. (271.1)

$$\xrightarrow{\text{Eq. (272.2)}} [v_i - p_i/m, r_j] = 0$$

como $[r_i, r_j] = 0$ → podemos escrever $\vec{v} = \frac{1}{m}(\vec{p} - \vec{A}(\vec{r}))$ (274.2)

- sobre o hamiltoniano H,

se $H_0 = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \vec{A}(\vec{r}))^2$

↳ $\vec{v}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}(t), H_{0,H}] = \frac{1}{m}(\vec{p}(t) - \vec{A}(\vec{r}))^2$

entretanto,

$[H - H_0, r_i] = [H - \frac{1}{2} m v_j v_j, r_i]$

tilibra

$= \underbrace{[H, r_i]}_{= -i\hbar v_i} - \frac{1}{2m}\left(v_j [v_j, r_i] + \underbrace{[v_j, r_i]}_{-\frac{1}{m}\underbrace{[v_j, G_i]}_{= i\hbar \delta_{ij}}} v_j \right) = 0$

↑ Eq. (274.1) p/ $t = 0$

como $[r_i, r_j] = 0 \rightarrow H - H_0 \propto \Phi(\vec{r})$

$\hookrightarrow H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \vec{A}(\vec{r}))^2 + \Phi(\vec{r})$: (275.1)

: invariante sob transf. de Galileu

notar: hamiltoniano (264.1) : partícula massa m e carga q sob campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$: invariante sob transfs. de gauge e Galileu.

Resumo: Eqs. (272.1) e (272.2).

$U(\vec{v}) = e^{i\vec{v}\cdot(m\vec{r})/\hbar}$: op. unitário ~ transf. instântanea ($t=0$) de Galileu (275.2)

verifica-se que, caso geral, (veja P15.7, Messiah)

$U(\vec{v}, t) = \exp\left(i\vec{v}\cdot(m\vec{r} - \vec{p}t)/\hbar\right)$ (275.3)

Obs.:

(1) verifica-se que Eq. (275.2) OK p/ partícula c/ spin;

(2) p/ sistema invariante sob <u>transformação de Lorentz</u>:

$[\vec{G}, \vec{p}] \propto H$

$[G_i, G_j] \propto \vec{J}$: comparar Eq. (271.3)

· vamos verificar Eq. (273.1).

Eqs. (270.1) e (270.4):

$$U(\vec{\sigma})\,[\vec{r}(t), H_H]\,U^{+}(\vec{\sigma}) = [\vec{r}(t), H_H] - i\hbar\vec{\sigma}$$

$$[\,U(\vec{\sigma})\,\vec{r}(t)\,U^{+}(\vec{\sigma}),\; U(\vec{\sigma})\,H_H\,U^{+}(\vec{\sigma})\,] = [\vec{r}(t), H_H] - i\hbar\vec{\sigma}$$

em $t=0$: $$[\,\underbrace{U(\vec{\sigma})\,\vec{r}\,U^{+}(\vec{\sigma})}_{\text{Eq. (271.1)} \; = \vec{r}},\; U(\vec{\sigma})\,H\,U^{+}(\vec{\sigma})\,] = [\vec{r}, H] - i\hbar\vec{\sigma}$$

$\hookrightarrow$ $$[\,U(\vec{\sigma})\,H\,U^{+}(\vec{\sigma}) - H,\; \vec{r}\,] = i\hbar\vec{\sigma}$$

$\hookrightarrow$ $$U(\vec{\sigma})\,H\,U^{+}(\vec{\sigma}) - H = -\vec{p}\cdot\vec{\sigma} + F(\vec{r}) = -(\vec{p} - \vec{A}(\vec{r}))\cdot\vec{\sigma} \qquad (276.1)$$

Eqs. (271.2) e (276.1) p/ $\vec{A}(\vec{r}) = 0$:

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{\sigma}\cdot\vec{G}\right) H \left(1 + \frac{i}{\hbar}\vec{\sigma}\cdot\vec{G}\right) - H = -\vec{p}\cdot\vec{\sigma}$$

$$-\frac{i}{\hbar}[\vec{\sigma}\cdot\vec{G}, H] = -\vec{p}\cdot\vec{\sigma}$$

ou $$\sum_j \sigma_j [G_j, H] = -i\hbar\, p_j \sigma_j$$

$\hookrightarrow$ $[G_j, H] = -i\hbar p_j$ ou $[\vec{G}, H] = -i\hbar\vec{p}$