Simetrias

- Na física clássica, temos a Lagrangeana $L = L(q,\dot{q})$. Se L é invariante pelo deslocamento de q_i: $q_i \to q_i + \delta q_i$, é sinal que $\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$. Mas $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \frac{d p_i}{d t} = 0$ onde $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ é o momento canônico (associado a q_i). $\Rightarrow p_i$ é CTE.

- No formalismo Hamiltoniano $H = H(q_i, p_i)$. Temos $\frac{dp_i}{dt} = 0$ quando $\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$
$\Rightarrow p_i$ é conservado.

- Quando a Hamiltoniana não depende de q_i $\Leftrightarrow$ H é simétrica sob translação $q_i \to q_i + \delta q_i$
$\Rightarrow$ temos quantidade conservada.

- Na MQ associamos op. unitários D a transformações (ex. rotação e translação).
- Operações infinitesimais têm a forma $D = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G$, onde G é o gerador da operação (que aqui, chamaremos de transformação de simetria).
- Suponha que a Hamiltoniana H seja invariante sob D.

$$\Rightarrow D^{\dagger} H D = H \Leftrightarrow HD = DH \Leftrightarrow [H, D] = 0 \Leftrightarrow [H, G] = 0$$

- Nesse caso, a eq. de movimento de Heisenberg p/ G será $\frac{dG}{dt} = 0$
$\Rightarrow G$ é CTE do movimento.

Ex: H invariante por translação $\Rightarrow \vec{p}$ é CTE
H " rotação $\Rightarrow \vec{L}$ é CTE.

- Vejamos o que acontece com autovetor de G quando $[G,H]=0$

$$|g,t\rangle = U(t)|g'\rangle \qquad \hookrightarrow G|g'\rangle = g'|g'\rangle$$

[inicial, auto-vet. de g.

$$G\left[U(t)|g'\rangle\right] = \underbrace{U(t)G}_{[G,H]=0 \Rightarrow [G,U]=0}|g'\rangle = g'\left[U(t)|g'\rangle\right].$$

$\Rightarrow U(t)|g'\rangle$ também é autovetor de G, com mesmo autovalor.

Degenerescências

- Suponha que $[H,D]=0$, onde D é op. de simetria.
- $H|n\rangle = E_n|n\rangle \Rightarrow D|n\rangle$ também é autovetor de H com mesma energia:

$$H(D|n\rangle) = D\,H|n\rangle = E_n(D|n\rangle)$$

- Isso significa que se $|n\rangle \neq D|n\rangle$, os dois têm a mesma energia, ou seja, são estados degenerados. Se D é operador com parâmetros contínuos (λ), temos que toda a classe de estados $D(\lambda)|n\rangle$ tem a mesma energia.

- Vamos considerar o caso de rotações. Se a Hamiltoniana é invariante por rotações, $[D(R),H]=0 \Rightarrow [\vec{J},H]=[J^2,H]=0$. (já que $\vec{J}$ é o gerador das rotações)

- Podemos então escolher auto-estados simultâneos de $\{H, J^2, J_z\}$, denotados $|n,j,m\rangle$.

- Pelo argumento acima, todos os estados da forma $D(R)|njm\rangle$ têm a mesma energia

- Rotações "misturam" os valores de m:

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

⇒ como temos $(2j+1)$ valores diferentes de m, essa é a degenerescência.

- Aplicação: interação spin-órbita.
  - Considere e^- em átomo tal que o potencial é $V=V(r)+V_{LS}\vec{L}\cdot\vec{S}$
  - r e $\vec{L}\cdot\vec{S}$ são escalares ⇒ invariantes por rotação.

    ⇒ temos degenerescência $(2j+1)$ para cada nível de energia.
  - Se aplicamos campo elétrico ou magnético na direção $\hat{z}$ (por exemplo), quebramos a degenerescência ⇒ energia agora depende de m.

    Efeito Zeeman ⇔ $\vec{B}$

    Efeito Stark ⇔ $\vec{E}$

    ↳ Não é o Homem de Ferro!

SIMETRIAS DISCRETAS - PARIDADE

- Até agora temos discutido simetrias contínuas (rotação, translação, etc). Vamos agora passar a discutir simetrias discretas, e a primeira é a simetria de paridade, ou inversão espacial.

- A transformação de paridade consiste na inversão das coordenadas: $\vec{x} \to -\vec{x}$.

- Na MQ essa transformação é representada por um operador unitário Π tal que $|\alpha\rangle \to \Pi|\alpha\rangle$, e requeremos que

$$\langle\alpha|\Pi^\dagger \vec{x}\,\Pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\vec{x}|\alpha\rangle$$ (= inversão dos valores esperados da posição).

$$\Leftrightarrow \Pi^\dagger \vec{x}\,\Pi = -\vec{x}$$

$$\Leftrightarrow \vec{x}\,\Pi = -\Pi\vec{x}$$

ou seja, $\vec{x}$ e Π devem <u>anti</u>-comutar.

- Como se transformam auto-estados de posição?

$\Pi|\vec{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\vec{x}'\rangle$ onde δ é real ($e^{i\delta}$ é fase). Isso é porque

$\vec{x}\left(\Pi|\vec{x}'\rangle\right) = -\Pi\vec{x}|\vec{x}'\rangle = -\vec{x}'\left(\Pi|\vec{x}'\rangle\right)$, ou seja, se

$\Pi|\vec{x}'\rangle$ é auto-est. de $\vec{x}$ com autovalor $-\vec{x}'$

$\Rightarrow \Pi|\vec{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\vec{x}'\rangle$. Por convenção escolhemos $\delta=0$

$$\Rightarrow \boxed{\Pi|\vec{x}'\rangle = |-\vec{x}'\rangle}$$

- $\Pi^2|\vec{x}'\rangle = \Pi\underbrace{\Pi|\vec{x}'\rangle}_{|-\vec{x}'\rangle} = |\vec{x}'\rangle \Rightarrow \boxed{\Pi^2 = \mathbb{1}}$ (retornamos ao estado original com 2 inversões)

- Como $\Pi\Pi = \mathbb{1} \Rightarrow \Pi^{-1} = \Pi^\dagger = \Pi$

$\Rightarrow \Pi$ é unitário e Hermitiano.

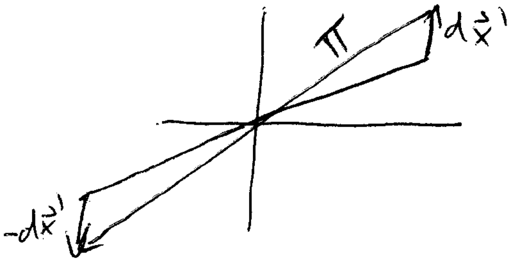
- Como $\Pi^2 = \mathbb{1} \Rightarrow$ autovalores ±1.

$\Pi = \sum_i \lambda_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$, $\Pi^2 = \sum_i\sum_j \lambda_i\lambda_j|\lambda_i\rangle\underbrace{\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle}_{\delta_{ij}}\langle\lambda_j|$

$= \sum_i \lambda_i^2|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| = \mathbb{1} = \sum_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$

$\Rightarrow \lambda_i = \pm 1$.

• $\vec{p}$ é o gerador de translações. Uma translação seguida de inversão espacial corresponde à translação inversa. Veja:



Então: $\Pi D(d\vec{x}') = D(-d\vec{x}')\Pi \quad [\cdot\Pi^\dagger]$

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

$$\Rightarrow \Pi\vec{p}+\vec{p}\Pi=0 \Leftrightarrow \boxed{\Pi^\dagger\vec{p}\Pi=-\vec{p}}$$

$\Rightarrow$ Π também inverte o momento $\vec{p}$

• E $\vec{J}$? $[\Pi,\vec{L}]=0$ pois $\vec{L}=\vec{x}\times\vec{p}$ e os dois trocam sinal $\Rightarrow \vec{L}$ não muda.

Para spins, lembre que $\vec{J}$ é o gerador de rotações. Para matrizes ortogonais 3×3, vale $R^{PARIDADE}R^{ROT}=R^{ROT}R^{PARIDADE}$ com

$$R^{PARIDADE}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

. O mesmo deve valer p/ as rotações de estado:

$$\boxed{\Pi D(R)=D(R)\Pi}$$

Como $D(R)=\mathbb{1}-\frac{i\vec{J}\cdot\hat{n}\varepsilon}{\hbar} \Rightarrow [\Pi,\vec{J}]=0$

$$\Leftrightarrow \boxed{\Pi^\dagger\vec{J}\Pi=\vec{J}}$$

• Resumindo: (p/ op. vetoriais)

$\vec{x} \xrightarrow{\Pi} -\vec{x}$ } vetores polares (ímpares sob Π)
$\vec{p} \to -\vec{p}$
$\vec{J} \to \vec{J}$ } vetores axiais, ou pseudo-vetores.

• E escalares?

$\Pi^{-1}\vec{S}\cdot\vec{x}\,\Pi = -\vec{S}\cdot\vec{x}$ → op. pseudo-escalar

$\Pi^{-1}\vec{L}\cdot\vec{S}\,\Pi = \vec{L}\cdot\vec{S}$ → op. escalar

Π e função de onda

$$\psi(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \alpha \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{x}' | \Pi | \alpha \rangle = \langle -\vec{x}' | \alpha \rangle = \psi(-\vec{x}')$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{x}') \xrightarrow{\Pi} \psi(-\vec{x}')$$

- Se $|\alpha\rangle$ é auto-estado de Π, sabemos que o autovalor associado é ± 1:

$$\Pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{x}' | \Pi | \alpha \rangle = \pm \langle \vec{x}' | \alpha \rangle \\ \underbrace{\langle \vec{x}' | \Pi | \alpha \rangle}_{} = \boxed{-} \langle \vec{x}' | \alpha \rangle = -\psi(\vec{x}') \end{array} \right\} \Rightarrow \psi(-\vec{x}') = \pm \psi(\vec{x}')$$

Paridade

PAR

ÍMPAR

- Auto-estados do momento angular orbital devem ser auto-estados de Π (pois $[\Pi, \vec{L}] = 0$). Vamos ver:

$$\langle \vec{x}' | \alpha, lm \rangle = R_\alpha(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\vec{x}' \to -\vec{x}' \text{ é equivalente a } \left\{ \begin{array}{l} r \to r \\ \theta \to \pi - \theta \quad (\cos\theta \to -\cos\theta) \\ \phi \to \phi + \pi \quad (e^{im\phi} \to (-1)^m e^{im\phi}) \end{array} \right.$$

- É fácil mostrar que $Y_l^m \xrightarrow{\Pi} (-1)^l Y_l^m \Rightarrow \boxed{\Pi|\alpha, lm\rangle = (-1)^l |\alpha, lm\rangle}$

- SS auto-est. de Π, com paridade definida por l.

• Π e auto-estados de energia

Suponha que $[H,\Pi]=0$ e seja $|n\rangle$ um auto-estado não-degenerado de H com autovalor E_n: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

Então $|n\rangle$ é auto-estado de Π.

Prova: Vamos primeiro mostrar que $\frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\Pi)|n\rangle$ é auto-estado de Π com autovalor ±1.

$$\Pi\left(\frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\Pi)|n\rangle\right) = \frac{1}{2}(\Pi\pm\underbrace{\Pi^2}_{\mathbb{1}})|n\rangle = \frac{1}{2}(\Pi\pm\mathbb{1})|n\rangle = \pm\frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\Pi)|n\rangle) \quad \text{OK}$$

Mas $\frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\Pi)|n\rangle$ também é autovetor de H com autovalor E_n:

$$H\left[\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle\right] = \frac{1}{2}\underbrace{H|n\rangle}_{=E_n|n\rangle} \pm \frac{1}{2}\underbrace{H\pi|n\rangle}_{\substack{=\Pi H|n\rangle \\ =\Pi E_n|n\rangle}} = E_n\left[\frac{1}{2}(1\pm\Pi)|n\rangle\right] \quad \text{OK}$$

Além do mais, $|n\rangle$ e $\frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\pi)|n\rangle$ devem representar o mesmo estado (pois ele não é degenerado)

$\Rightarrow |n\rangle$ é auto-est. de paridade. OK

Exemplo: Oscilador harmônico. $|0\rangle$ é Gaussiano ⇒ é par sob $\Pi: \vec{x}\to-\vec{x}$.

$$|1\rangle = a^{+}|0\rangle = (c\cdot\underset{\substack{\uparrow \\ \text{ÍMPAR}}}{x} + D\cdot\underset{\substack{\uparrow \\ \text{ÍMPAR}}}{p})|0\rangle \Rightarrow |1\rangle \text{ deve ser ímpar.}$$

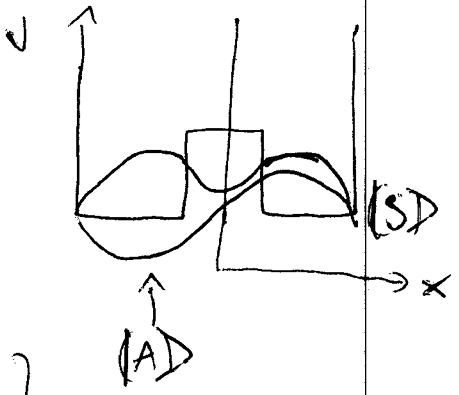
⇒ A paridade de $|n\rangle$ é $(-1)^n$.

• A não-degenerescência é importante aqui.

Ex: átomo de Hidrogênio. As energias dependem de n, mas há degenerescência. E de fato $c_1|\underset{\ell=1}{\underset{\uparrow}{2p}}\rangle + c_2|\underset{\ell=0}{\underset{\uparrow}{2s}}\rangle$ não tem paridade definida.

Ex. Auto-estado de momento. $|\vec{p}'\rangle$ é auto-est. de energia e momento, mas não é auto-est. de Π. Isso não viola nosso teorema pois há degenerescência na energia ($|\vec{p}'\rangle$ e $|-\vec{p}'\rangle$ têm mesma energia).

Exemplo: Poço duplo simétrico.



• H é invariante por paridade (pois V(x) é).

• $|S\rangle$ é est. fundamental (simétrico)
$|A\rangle$ é 1º est. excitado (anti-simétrico) } são auto-est. simultâneos de H e Π. (estados estacionários)

• Podemos definir 2 estados não-estacionários:

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle) \quad , \quad |E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle)$$

(concentrado na direita) (esquerda)

que não são mais auto-est. de Π, nem de H.

$\Delta E = E_A - E_S$

Se em $t=0$ temos $|D\rangle$, a evolução temporal será:

$$|D,t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}}|S\rangle + e^{-i\frac{E_A t}{\hbar}}|A\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{E_S t}{\hbar}}\left(|S\rangle + e^{-i\frac{(\Delta E)t}{\hbar}}|A\rangle\right)$$

- O sistema oscila entre $|D\rangle$ e $|E\rangle$ com frequência angular

$$\omega = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}$$

⇒ podemos também entender isso como <u>tunelamento</u>.

- Agora fazemos a barreira do potencial $\to \infty$.

⇒ $|S\rangle$ e $|A\rangle$ agora são degenerados, logo $|D\rangle$ e $|E\rangle$ são auto-est. de energia (mas não de Π).

Se iniciarmos o sist. em $|D\rangle$, ele fica lá p/ sempre.

⇒ Com degenerescência, a simetria de paridade de H não é necessariamente obedecida pelos seus auto-estados ⇒ <u>QUEBRA da simetria</u>

—— || ——

Outro exemplo de quebra de simetria: ímã. H p/ ferro é invariante por rotação, mas o ímã claramente tem direção preferencial. Os infinitos estados fundamentais não têm mais a simetria de H.

<u>Π e regras de seleção</u>

- Sejam $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ auto-estados de paridade:

$$\Pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \qquad \varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta = \pm 1$$
$$\Pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle$$

- Vamos mostrar que $\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle = 0$ exceto se $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$.

⇒ O operador $\vec{x}$, que é ímpar, só conecta estados de paridade diferente.

Prova: $$\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\beta|\Pi^{-1}}_{\varepsilon_\beta\langle\beta|}\underbrace{\Pi\, x\, \Pi^{-1}}_{-\vec{x}}\underbrace{\Pi|\alpha\rangle}_{\varepsilon_\alpha|\alpha\rangle}$$

$$= \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\left(-\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle\right)$$

- Se $\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle \neq 0$, preciso que $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$.

- Vocês provavelmente já encontraram esta regra assim:

$$\int \psi_\beta^* \vec{x}\, \psi_\alpha \, dx = 0 \quad \text{se } \psi_\beta, \psi_\alpha \text{ têm mesma paridade.} \quad (*)$$

- Esta regra é importante na discussão de transições entre estados atômicos.

- Se H é invariante sob Π, estados não-degenerados não podem ter momento de dipolo elétrico permanente:

$$\langle n|\vec{x}|n\rangle = 0 \quad [\text{consequência de } (*) \text{ acima}]$$

- Podemos generalizar nossas conclusões p/ outros operadores:
  - Op. ímpares sob Π (ex. $\vec{p}$, $\vec{S}\cdot\vec{x}$) só têm elementos de matriz $\neq 0$ entre estados de paridade diferente.
  - Op. pares sob Π conectam estados de mesma paridade.

- Não-conservação de paridade. Em 1956 Lee e Yang propuseram uma Hamiltoniana não invariante sob Π p/ descrever decaimentos de partículas devido à força fraca. Essa proposta de que a paridade não é conservada nessas interações foi comprovada experimentalmente.

SIMETRIA de reversão temporal [SAK 4.4]

- Nome + apropriado: reversão do movimento.

- Em Mecânica clássica, imagine inverter o momento de uma partícula em $t=0$: $\vec{p}|_{t=0} \to -\vec{p}|_{t=0}$

Mais formalmente: se $\vec{x}(t)$ é solução de $m\ddot{\vec{x}} = -\nabla V(\vec{x})$, então $\vec{x}(-t)$ também é. [Aqui não temos dissipação.]

- Se tivermos um campo magnético $\vec{B}$ daria para identificar o cenário com "inversão temporal" pois a partícula passaria a rodar no sentido contrário.(*) Ou não? (*)[em relação ao que esperamos pelos pólos N/S de $\vec{B}$]
  - Se *todos* as partículas sofrem a inversão, as cargas que geram $\vec{B}$ também invertem o movimento e tudo fica consistente.
  - Mais formalmente: As eqs. de Maxwell + a força de Lorentz $\vec{F} = e[\vec{E} + \frac{1}{c}(\vec{v}\times\vec{B})]$ ficam invariantes sob a transformação

$$\{t\to -t,\ \vec{E}\to\vec{E},\ \vec{B}\to-\vec{B},\ \rho\to\rho,\ \vec{J}\to-\vec{J},\ \vec{v}\to-\vec{v}\}.$$

- Vamos agora ver o que acontece com a eq. de Schrödinger:

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

. Assuma que $\psi(\vec{x},t)$ é solução.

- $\psi(\vec{x},-t)$ não é solução (por causa da derivada $\frac{d}{dt}$), MAS
- $\psi^*(x,-t)$ é solução — basta subst. no conjugado da eq. de Schrödinger:

- Conjugando a eq. de Schrödinger:

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

Agora $t \to -t$

$$\frac{\partial}{\partial t} \to -\frac{\partial}{\partial t}$$

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

$\Rightarrow \psi^*(x,-t)$ é solução se $\psi(x,t)$ é.

$\Rightarrow$ Na MQ, <u>reversão temporal</u> deve ter a ver com conjugação. Veremos isso com mais cuidado.

OPERADORES anti-unitários de simetria

- Se uma op. de simetria leva $\begin{cases} |\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle \\ |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle \end{cases}$, é natural queremos que $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$.

Isso acontece p/ op. Π, rotações, translações, e é consequência dessas op. de simetria serem <u>unitárias</u>: $\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$

- Há outras op. de simetria que são <u>menos restritivas</u>. Podemos impor somente que $|\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle| = |\langle\beta|\alpha\rangle|$. Essa condição é satisfeita se $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle$

<u>Definição</u>: A transformação θ que transforma: $|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle$

é <u>ANTIUNITÁRIA</u> se a) $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$ [← op. ANTIUNITÁRIO]

(op. ANTILINEAR) → b) $\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle$

- Veremos agora que op. anti-unitários podem ser escritos como $\Theta = UK$, com U unitário e K o op. de conjugação complexa que leva $(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) \to (a^*|\psi\rangle + b^*|\phi\rangle)$. Temos que:

$$K c|\alpha\rangle = c^* K|\alpha\rangle$$ [← Aqui mantenho K pois $|\alpha\rangle$ pode também ser escrito com coeficientes a serem conjugados.]

Aqui o próprio $|\alpha\rangle$ pode ser expandido na base $\{|a_i\rangle\}$:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle \xrightarrow{K} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* K|a_i\rangle$$

$$= \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* |a_i\rangle$$

Repare que K atuando em vetor-base não o muda: $|a_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

- Ação de K depende da base. Ex: auto-st. de S_y (base S_z) ← muda
  e
  auto-st. de S_y (base S_y) ← não muda sob K.

→ por isso, a forma de U em $\Theta = UK$ depende da base (= representação) escolhida.

- Vamos agora verificar que $\Theta = UK$ satisfaz b): $\Theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\Theta|\alpha\rangle + c_2^*\Theta|\beta\rangle$

$$\Theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle)$$

$$= c_1^* \underbrace{UK}_{\Theta}|\alpha\rangle + c_2^* \underbrace{UK}_{\Theta}|\beta\rangle \quad \text{OK.}$$

- Antes de verificar a propriedade a), lembre de só aplicar Θ em kets. Bra's são definidos como funcionais lineares de kets, e essa definição causa problemas ao trabalharmos com op. anti-lineares.

- Propriedade a): $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$

$$|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle^* UK|a_i\rangle = \sum_i \underset{\rightleftarrows}{\langle a_i|\alpha\rangle^*} U|a_i\rangle$$

$$= \sum_i \langle\alpha|a_i\rangle U|a_i\rangle$$

$$\Rightarrow |\tilde{\beta}\rangle = \sum_i \langle a_i|\beta\rangle^* U|a_i\rangle \iff \langle\tilde{\beta}| = \sum_i \langle a_i|\beta\rangle\langle a_i|U^\dagger$$

$$\Rightarrow \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_j\sum_i \langle a_j|\beta\rangle\underbrace{\langle a_j|\underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}}|a_i\rangle}_{\delta_{ij}}\langle\alpha|a_i\rangle = \sum_i \langle\alpha|a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle$$

$$= \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* \quad \text{OK}.$$

- Para provar o módulo do produto interno, basta considerar op. unitários e anti-unitários ⇒ a prova é complicada e pode ser encontrada em Gottfried (p. 284-285) p/o caso de dim($\mathcal{H}$) = 2.

[Resultado conhecido como teorema de Wigner]

||

Operador de reversão temporal Θ

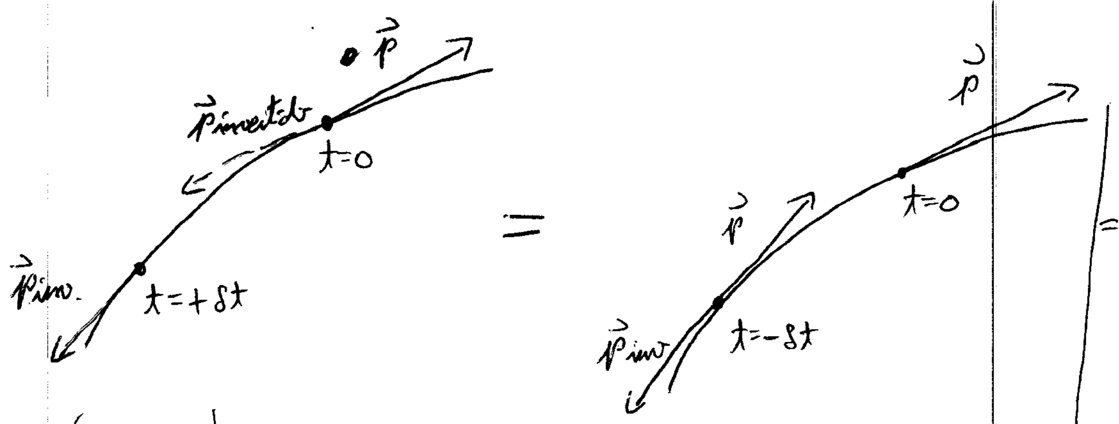
- $|\alpha\rangle \to \Theta|\alpha\rangle$, $\Theta|\alpha\rangle$ é o estado com movimento revertido.
- Esperamos que Θ reverta $\vec{p}$ e $\vec{J}$.
- Vamos considerar uma evolução temporal infinitesimal:

$$|\alpha, \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$$

- Vamos fazer a inversão temporal em $|\alpha\rangle$, e em seguida evoluir o estado:

$$\left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle$$

- Se o movimento é simétrico por reversão temporal, esperamos que este estado seja o mesmo que: $\Theta|\alpha, -\delta t\rangle$



Estado clássico
= posição, momento.

$$\left(1-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle = \underbrace{\Theta|\alpha,-\delta t\rangle}$$

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

- Para isso ser verdade para qualquer $|\psi\rangle$, preciso que
  $$-iH\Theta|\psi\rangle = \Theta iH|\psi\rangle \quad \forall\ |\psi\rangle.$$

- Se Θ fosse unitário, dividimos por i dos 2 lados $\Rightarrow -H\Theta = \Theta H$

  - Assumindo essa hipótese, considere autoestado $|n\rangle$ de H com energia E_n. Então $H(\Theta|n\rangle) = -\Theta H|n\rangle = -E_n(\Theta|n\rangle)$

    $\Rightarrow \Theta|n\rangle$, que é o estado revertido temporalmente, seria auto-est. de H com autovalor $-E_n$, o que não faz sentido (temos cota inferior p/ E_n)

- Isso mostra que Θ deve ser anti-unitário. Nesse caso
  $$-iH\Theta|\psi\rangle = \underbrace{\Theta\, iH|\psi\rangle}_{-i\Theta H|\psi\rangle} \ \forall|\psi\rangle \Rightarrow \boxed{\Theta H = H\Theta}$$

——— || ———

- Antes de discutir a transformação de op. sob H, vamos lembrar de não trabalhar com Θ atuando em bras. Ainda assim, podemos usar $\langle\beta|\Theta|\alpha\rangle = (\langle\beta|)(\Theta|\alpha\rangle)$

- Vamos agora discutir o comportamento de operadores sob Θ.

De novo: $|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$, $|\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle$

- Seja A um op. <u>linear</u>. Então

$$\boxed{\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle} \quad ⊛$$

Prova: Defina $|\gamma\rangle \equiv A^{\dagger}|\beta\rangle \Leftrightarrow \langle\beta|A = \langle\gamma|$

$$\Rightarrow \langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\underbrace{\tilde{\gamma}}_{\Theta A^{\dagger}|\beta\rangle}\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^{\dagger}\underset{\Theta^{-1}\Theta}{\wedge}|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^{\dagger}\Theta^{-1}\underbrace{\Theta|\beta\rangle}_{|\tilde{\beta}\rangle}$$

$$= \langle\tilde{\alpha}|\Theta A^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle \quad \underline{\text{CQD}}.$$

—— || ——

- Se A for Hermitiano, $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$
- Dizemos que observáveis são pares ou ímpares sob reversão temporal se

$$\Theta A\Theta^{-1} = \overset{\text{PAR}}{\underset{\text{ÍMPAR}}{\pm}} A$$

- Junto com o teorema ⊛ acima, obtemos uma restrição sobre os elementos de matriz de A entre $\langle\tilde{\beta}|$ e $|\tilde{\alpha}\rangle$:

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\beta}|A|\tilde{\alpha}\rangle^{*}$$

. No caso de valores esperados $|\beta\rangle = |\alpha\rangle$:

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

$\boxed{\vec{p}}$

- Como exemplo, vamos considerar o valor esperado de $\vec{p}$. Esperamos que $\langle\alpha|\vec{p}|\alpha\rangle = -\langle\tilde{\alpha}|\vec{p}|\tilde{\alpha}\rangle$ $\Rightarrow \Theta\vec{p}\Theta^{-1} = -\vec{p}$ e $\vec{p}$ é operador ímpar sob Θ.

$$\Rightarrow \underbrace{p}_{-\Theta\vec{p}\Theta^{-1}}(\Theta|\vec{p}'\rangle) = -\Theta\vec{p}\underbrace{\Theta^{-1}\Theta}_{\mathbb{1}}|\vec{p}'\rangle = -\Theta\underbrace{\vec{p}|\vec{p}'\rangle}_{\vec{p}'|\vec{p}'\rangle} = -\vec{p}'(\Theta|\vec{p}'\rangle)$$

$\Rightarrow$ <u>$\Theta|\vec{p}'\rangle$ é auto-estado de momento com autovalor $-\vec{p}'$.</u>

$\boxed{\vec{x}}$

- Da mesma forma $\langle\alpha|\vec{x}|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\vec{x}|\tilde{\alpha}\rangle \Rightarrow \Theta|\vec{x}'\rangle = |\vec{x}'\rangle$.

- Vamos agora verificar a invariância da rel. fundamental de comutação sob Θ:

$$[x_i, p_j]|\psi\rangle = i\hbar\delta_{ij}|\psi\rangle \quad \forall|\psi\rangle.$$

Aplico Θ:

$$\underbrace{\Theta[x_i, p_j]}\underbrace{\Theta^{-1}\Theta}_{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \Theta i\hbar\delta_{ij}|\psi\rangle$$

$$[x_i, -p_j]\Theta|\psi\rangle = -i\hbar\delta_{ij}\Theta|\psi\rangle$$

$\leftarrow$ a relação é preservada (e realmente precisamos da conjugação).

$\boxed{\vec{J}}$

- De forma similar, para preservar $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ precisamos que $\boxed{\Theta\vec{J}\Theta^{-1} = -\vec{J}}$, o que é consistente p/ partícula sem spin, já que $\vec{J} = \vec{L} = \vec{x}\times\vec{p}$.

Funções de onda - partícula sem spin

- Suponha que temos uma partícula sem spin no estado $|\alpha\rangle$. Na base de posição:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle$$

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

$\Rightarrow$ Vemos que $\boxed{\psi(\vec{x}') \xrightarrow{\Theta} \psi^*(\vec{x}')}$

- Na base de Harmônicos esféricos, temos: $Y_\ell^m(\theta,\phi) \to Y_\ell^{m*}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\theta,\phi)$

, ou seja, $\boxed{\Theta|\ell, m\rangle = (-1)^m|\ell, -m\rangle}$

- Consequência não-trivial de invariância por reversão temporal:

<u>Teorema</u>: Suponha que H seja invariante por Θ e que $|n\rangle$ seja auto-est. não degenerado de H. Então a autofunção é real.

<u>PROVA</u>: $H(\Theta|n\rangle) = \Theta H|n\rangle = E_n(\Theta|n\rangle)$ $\Rightarrow$ $|n\rangle$ e $\Theta|n\rangle$ têm a mesma energia.

Como $|n\rangle$ é não-degenerado, eles devem representar o mesmo estado.

$$\left.\begin{aligned} \text{Autofunção de } |n\rangle &= \langle\vec{x}'|n\rangle \\ {''} \quad \Theta|n\rangle &= \langle\vec{x}'|n\rangle^* \end{aligned}\right\} \Rightarrow \langle\vec{x}'|n\rangle = \langle\vec{x}'|n\rangle^* \Rightarrow \langle\vec{x}'|n\rangle \text{ é real.}$$

- Na base de momentos $\{|\vec{p}'\rangle\}$, Θ opera assim:

$$\Theta|\alpha\rangle = \int d^3p'\, |\ominus\vec{p}'\rangle\langle p'|\alpha\rangle^*$$

ou seja, na base dos momentos temos $\phi(\vec{p}') \rightarrow \phi^*(-\vec{p}')$

[exemplo da dependência com a base da ação do op. Θ].

Inversão temporal p/ spin $\frac{1}{2}$ [GOTT. 7.2]

- Vimos que p/ momento angular $\vec{J}$: $\Theta \vec{J} \Theta^{-1} = -\vec{J}$

- Lembrando que $\Theta = U\underset{\uparrow \text{conjugação}}{K}$ $\Rightarrow$ $UK\vec{S}\underbrace{KU^{+}}_{\Theta^{-1}} = U\vec{S}^{*}U^{+} = -\vec{S}$

- Na representação padrão, $\begin{cases} \sigma_x \text{ e } \sigma_z \text{ são reais} \\ \sigma_y \text{ é imaginário} \end{cases}$

$$\Rightarrow \begin{cases} U\sigma_x U^{+} = -\sigma_x \\ U\sigma_y U^{+} = \sigma_y \\ U\sigma_z U^{+} = -\sigma_z \end{cases}$$

$U = e^{i\delta}\sigma_y$ satisfaz essas eqs. É uma rotação de π rad. em torno do eixo y

- $\Theta|+\rangle_z = e^{i\delta} S_y|+\rangle_z = i e^{i\delta}|-\rangle_z$

$\Theta|-\rangle_z = e^{i\delta} S_y|-\rangle = -i e^{i\delta}|+\rangle_z$

- Como Θ afeta autoestados de $\begin{Bmatrix} \vec{r} \\ \text{ou} \\ \vec{p} \end{Bmatrix}$ e S_z?

$$\begin{cases} \Theta|\vec{p}, \overset{S_z}{\overset{\downarrow}{m}}\rangle = e^{i\delta} i^{m}|-p, -m\rangle \\ \Theta|\vec{r}, m\rangle = e^{i\delta} i^{m}|\vec{r}, -m\rangle \end{cases}$$

← na repres. de coordenadas, só o auto-estado de spin é afetado.

- Na representação de coordenadas temos

$$\Theta = e^{i\delta}\sigma_y K$$

- Vamos agora mostrar que $\Theta^2 = -1$ para o caso de spin $\frac{1}{2}$.

$$\Theta(\underbrace{\overset{|\psi\rangle}{c_+|+\rangle + c_-|-\rangle}}) = c_+^* i e^{i\delta}|-\rangle + c_-^*(-i) e^{i\delta}|+\rangle$$

$$\Theta^2(\quad) = c_+(-i)e^{-i\delta}e^{i\delta}(-i)|+\rangle + c_-(+i)e^{-i\delta} i e^{i\delta}|-\rangle$$

$$= -c_+|+\rangle - c_-|-\rangle = -|\psi\rangle.$$

$\Rightarrow \boxed{\Theta^2 = -\mathbb{1}}$

- No caso de part. com spin 0, $\boxed{\Theta^2 = \mathbb{1}}$: Vimos que $\Theta|l,m\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle$

(e pode-se provar que isso é indep. da representação).

↳ veja problema 7.2 do GOTTFRIED/YAN.

- Consequência p/ sistema de N spins $\frac{1}{2}$:
  - $\Theta^2 = (-1)^N$ [Cada spin leva a uma fase (-1) na reversão temporal]
  - Seja $|E,N\rangle$ auto-estado de energia desse sistema, e assume que a Hamiltoniana seja invariante por reversão temporal. $\Rightarrow \Theta|E,N\rangle$ também deve ser auto-estado c/ mesma energia.
  - Assume que $|E,N\rangle$ seja não degenerado $\Rightarrow \Theta|E,N\rangle = \lambda|E,N\rangle$

$\Rightarrow \Theta^2|E,N\rangle = \lambda^*\lambda|E,N\rangle = (-1)^N|E,N\rangle$ → absurdo se N é ímpar.

$\Rightarrow$ teorema de Kramer: se um sist. de número ímpar de spins $\frac{1}{2}$ tem Hamiltoniana invariante sob Θ, todos seus est. estacionários são degenerados.