

Capítulo 7

Representação de Heisenberg e Simetrias

Quando apresentamos os postulados da Mecânica Quântica definimos de forma arbitrária que os estados evoluem no tempo ao passo que os observáveis são constantes. Esta maneira de analisar a evolução temporal de um sistema é chamada de *representação de Schrödinger*. Neste capítulo vamos mostrar que podemos reformular a Mecânica Quântica de forma a ter os estados constantes no tempo enquanto que os observáveis apresentam uma dependência temporal, o que define a *representação de Heisenberg*.

O uso de simetrias e leis de conservação permite-nos compreender melhor muitos problemas em Física, seja no domínio clássico ou no quântico. Neste capítulo também analisaremos os conceitos de simetria e de leis de conservação em Mecânica Quântica. Estudaremos ainda qual a relação entre degenerescência e simetrias.

7.1 Representação de Heisenberg

Na representação de Schrödinger que adotamos até agora, os estados evoluem com o tempo obedecendo a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle , \quad (7.1)$$

a qual deve ser suplementada com uma condição inicial $|\psi(t = 0)\rangle = |\psi_0\rangle$. Vimos no capítulo anterior que a solução formal deste problema é dada por

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\psi_0\rangle \quad (7.2)$$

onde $U(t)$ é operador evolução temporal. É importante lembrar neste ponto que os estados (funções de onda) não são diretamente observáveis, sendo que eles se manifestam, por exemplo, através de valores médios. Tendo em vista que os valores médios dependem tanto dos estados como dos operadores associados aos observáveis, podemos considerar que são os operadores, e não os estados, que evoluem no tempo sem alterar os resultados dos valores médios.

De fato, o valor esperado de um observável A no instante t é dado por

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | U^\dagger A U | \psi_0 \rangle, \quad (7.3)$$

onde utilizamos (7.2). A partir desta expressão definimos o operador na representação de Heisenberg $A_H(t)$ através de

$$A_H(t) = U^\dagger A U = e^{+i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}, \quad (7.4)$$

sendo que no instante $t = 0$ o operador na representação de Heisenberg coincide com o operador na representação de Schrödinger. Note que $A_H(t)$ é dependente do tempo a menos que A comute com a Hamiltoniana. Com isso temos que a média de um observável pode ser escrita como

$$\langle A \rangle = \langle \psi_0 | A_H(t) | \psi_0 \rangle. \quad (7.5)$$

Esta igualdade demonstra que podemos escolher, sem alterar o valor dos observáveis, os operadores evoluindo no tempo segundo (7.4) ao passo que os estados são constantes. Logo, definimos a representação de Heisenberg como sendo aquela na qual os estados são constantes no tempo, ao passo que os operadores obedecem (7.4). Note que para $t = 0$ os estados na representação de Schrödinger e na de Heisenberg são iguais, o mesmo acontecendo para os operadores. Mais ainda, para sistemas cuja Hamiltoniana na representação de Schrödinger independe do tempo temos que U e H comutam e conseqüentemente

$$H_H(t) = U^\dagger H U = U^\dagger U H = H,$$

i.e. a hamiltoniana é independente do tempo. Por simplicidade assumimos que este é sempre o caso.

É importante salientar que apenas a evolução temporal é modificada na representação de Heisenberg, ficando os postulados cinemáticos da Mecânica Quântica inalterados, bem como as suas conseqüências. Por exemplo, consideremos os seguintes fatos:

- Os operadores na representação de Heisenberg associados a operadores hermitianos na representação de Schrödinger também são hermitianos. Com isto, fica garantido que os valores médios de observáveis são reais. De fato,

$$A_H^\dagger = (U^\dagger A U)^\dagger = U^\dagger A^\dagger (U^\dagger)^\dagger = U^\dagger A U = A_H. \quad (7.6)$$

- Vimos anteriormente que os resultados possíveis de medidas são os autovalores do operador A associado à grandeza física. Na representação de Schrödinger estes autovalores não dependem do tempo visto que os operadores são constantes. Para garantir que as representações de Heisenberg e Schrödinger prevejam os mesmos resultados de medidas devemos mostrar que A_H e A possuem os mesmos autovalores. Isto de fato ocorre:

$$\begin{aligned} A|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\ U^\dagger A|a_n\rangle &= a_n U^\dagger|a_n\rangle \\ U^\dagger A U U^\dagger|a_n\rangle &= a_n U^\dagger|a_n\rangle \\ A_H (U^\dagger|a_n\rangle) &= a_n (U^\dagger|a_n\rangle), \end{aligned}$$

onde multiplicamos por U^\dagger a primeira equação para obter a segunda e também introduzimos o operador unidade $U U^\dagger$ na segunda. Logo, A_H e A possuem os mesmos autovalores. Mais ainda, sabemos que os autovetores de A_H no instante t são dados por $|a_n; t\rangle = U^\dagger|a_n\rangle$. Note que a base gerada pelos autovetores de A_H depende do tempo, podendo ser diferente a cada instante, enquanto seus autovalores são constantes.

- Dado um estado $|\psi(t)\rangle$ na representação de Schrödinger sabemos que a probabilidade de uma medida do observável A ter como

resultado o seu autovalor a_n é dada por

$$\text{Prob}(a_n) = |\langle a_n | \psi(t) \rangle|^2 .$$

Devemos, portanto, verificar se esta probabilidade é a mesma na representação de Heisenberg. Para tanto basta notar que

$$\begin{aligned} \text{Prob}(a_n) &= |\langle a_n | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle a_n; t | U^\dagger U | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= |\langle a_n; t | \psi_0 \rangle|^2 , \end{aligned}$$

onde utilizamos que $|a_n\rangle = U|a_n; t\rangle$. Note que na representação de Heisenberg a dependência temporal destas probabilidades origina-se no fato de que a base de autovetores de A_H muda com o tempo enquanto que o estado é constante!

Em aplicações é comum termos observáveis que são formados a partir do produto de outros. Isto posto, é útil saber que o operador de Heisenberg associado ao produto $C = AB$ é dado por

$$C_H(t) = U^\dagger A B U = U^\dagger A U \cdot U^\dagger B U = A_H(t) B_H(t) , \quad (7.7)$$

ou seja, pelo produto dos operadores de Heisenberg correspondentes. Em particular, este resultado aplica-se para comutadores:

$$[A, B] = C \quad \implies \quad [A_H(t), B_H(t)] = C_H(t) . \quad (7.8)$$

Daqui podemos inferir que

$$[x, p] = i\hbar \quad \implies \quad [x_H(t), p_H(t)] = i\hbar \quad (7.9)$$

que é a relação básica para o cálculo de comutadores.

7.1.1 Equações de Movimento de Heisenberg

Da definição do operador na representação de Heisenberg, equação (7.4), segue que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} &= -H e^{i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} H \\ i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} &= [A_H(t), H] \end{aligned} \quad (7.10)$$

que é a equação de movimento de Heisenberg para o operador $A_H(t)$. É instrutivo comparar a equação (7.10) com a sua correspondente em Mecânica Clássica em para um observável $A(q, p)$.

$$\frac{d}{dt}A(q(t), p(t)) = \{A, H\}(q, p), \quad (7.11)$$

onde $(q(t), p(t))$ é a trajetória clássica no espaço de fase, obedecendo a

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (7.12)$$

A comparação entre (7.10) e (7.11) remete-nos mais uma vez à regra de correspondência

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B] \quad (7.13)$$

entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica, a qual é usada como guia para a quantização de sistemas com análogos clássicos.

Para os observáveis $x(t)$ e $p(t)$ de um sistema cuja Hamiltoniana é da forma

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) \quad (7.14)$$

as equações de Heisenberg fornecem

$$\frac{dx_H}{dt} = \frac{p_H}{\mu}, \quad (7.15)$$

$$\frac{dp_H}{dt} = -V'(x_H), \quad (7.16)$$

onde utilizamos (7.7) para obter que $[p_H, V(x_H)] = \frac{\hbar}{i}V'(x_H)$. Note que estas equações são formalmente idênticas às de Hamilton na Mecânica Clássica.

Vejam alguns casos, assim como em Mecânica Clássica, nos quais estas equações podem ser integradas explicitamente.

Exemplo: partícula livre

No caso de uma partícula livre ($V \equiv 0$) a equação (7.16) reduz-se a

$$\frac{dp_H}{dt} = 0, \quad (7.17)$$

cuja solução é trivialmente dada por

$$p_H(t) = p \quad (7.18)$$

com p sendo o operador momento na representação de Schrödinger, *i.e.* $p = p_H(0)$. Substituindo este resultado em (7.15) segue que

$$\frac{dx_H}{dt} = \frac{p}{\mu} \quad (7.19)$$

de onde concluímos que

$$x_H(t) = x + \frac{p}{\mu}t, \quad (7.20)$$

onde $x = x_H(0)$ é o operador posição na representação de Schrödinger. Tendo em mãos esta solução, é interessante notar que $x_H(t_1)$ e $x_H(t_2)$ não comutam para $t_1 \neq t_2$! De fato,

$$\begin{aligned} [x_H(t_1), x_H(t_2)] &= \left[x + \frac{p}{\mu}t_1, x + \frac{p}{\mu}t_2 \right] \\ &= i \frac{\hbar(t_2 - t_1)}{\mu}. \end{aligned}$$

Exercício:

Interprete fisicamente a equação acima, ou seja, discuta se é possível fazer duas medidas infinitamente precisas da posição de uma partícula em tempos distintos. Qual é o impacto da sua conclusão sobre o conceito clássico de trajetória? Re-analise este problema utilizando a representação de Schrödinger.

Exemplo: oscilador harmônico

Inicialmente vamos obter a evolução temporal de um oscilador harmônico unidimensional utilizando as variáveis x_H e p_H . Para este sistema o potencial é dado por

$$V(x_H) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x_H^2,$$

que substituído em (7.16) conduz a

$$\frac{dp_H}{dt} = -\mu\omega^2 x_H . \quad (7.21)$$

Note que as equações de movimento para este sistema (7.15) e (7.21) são idênticas às equações clássicas. Por substituição direta notamos que a solução assume a mesma forma que a clássica

$$x_H(t) = x \cos(\omega t) + \frac{p}{\mu\omega} \sin(\omega t) \quad (7.22)$$

$$p_H(t) = -x\mu\omega \sin(\omega t) + p \cos(\omega t) , \quad (7.23)$$

contudo as constantes $x_H(0) = x$ e $p_H(0) = p$ são de fato os operadores posição e momento, respectivamente, na representação de Schrödinger.

Podemos também obter a evolução temporal de um oscilador harmônico simples utilizando os operadores de criação (a_H) e aniquilação (a_H^\dagger) definidos no capítulo 6. Nestas variáveis a hamiltoniana do sistema toma a forma

$$H = \hbar\omega \left(a_H^\dagger a_H + \frac{1}{2} \right) . \quad (7.24)$$

Utilizando que $[a_H, a_H^\dagger] = 1$, as equações de Heisenberg são

$$\frac{da_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [a_H, H] = -i\omega a_H , \quad (7.25)$$

$$\frac{da_H^\dagger}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [a_H^\dagger, H] = +i\omega a_H^\dagger . \quad (7.26)$$

cujas soluções são

$$a_H(t) = a_H(0) e^{-i\omega t} , \quad (7.27)$$

$$a_H^\dagger(t) = a_H^\dagger(0) e^{+i\omega t} . \quad (7.28)$$

7.2 Leis de Conservação

Leis de conservação são muito úteis em Física já que nos permitem simplificar e entender melhor os fenômenos. Por exemplo, na colisão de

duas partículas podemos obter a magnitude dos momentos finais utilizando a conservação de energia e a de momento dado o ângulo de espalhamento, mesmo que não conheçamos a seção de choque diferencial do processo. As leis de conservação possuem uma gama de aplicações muito mais vasta que essa, podendo ser usadas para saber se transições atômicas são permitidas ou não, para explicar a estabilidade de sistemas, etc.

Em Mecânica Clássica uma quantidade observável, digamos a energia, é conservada se o seu valor não variar com o tempo. A situação não é tão óbvia em Mecânica Quântica. Consideremos, a título de exemplo, um oscilador harmônico que se encontra no estado¹

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) , \quad (7.29)$$

onde $H|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$. É natural considerarmos este sistema como sendo conservativo porém medidas da energia em tempos distintos podem fornecer $\hbar\omega/2$ ou $3\hbar\omega/2$ ambas com probabilidade $1/2$. Portanto, temos que o valor medido da energia pode variar com o tempo. Então como podemos definir a conservação de energia? A resposta é simples: *o que se conserva em Mecânica Quântica é o valor médio do observável*. No exemplo acima o valor médio da energia é constante, valendo $\hbar\omega$.

Em Mecânica Quântica existe um critério muito simples para saber se uma dada quantidade é conservada ou não, bastando avaliar o seu comutador com a hamiltoniana do sistema. De fato, a partir da equação de Heisenberg (7.10) segue que o valor esperado de um observável A_H num estado $|\psi_0\rangle$ é obedece

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_0 | A_H | \psi_0 \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_0 | [A_H, H] | \psi_0 \rangle , \quad (7.30)$$

onde estamos trabalhando na representação de Heisenberg, e conseqüentemente a derivada em relação ao tempo atua somente sobre A_H . Portanto, o valor esperado de A_H será independente do tempo para qualquer estado $|\psi_0\rangle$ se $[A_H, H] = 0$, *i.e.* basta que A_H comute com a

¹Estamos aqui trabalhando na representação de Heisenberg, mas as conclusões são idênticas para a de Schrödinger.

hamiltoniana. Por exemplo, a hamiltoniana de uma partícula livre tridimensional comuta com todas as componentes do momento linear, bem como as do momento angular, logo, este sistema exhibe tanto conservação de momento linear como de momento angular.

Podemos também notar a partir de (7.30) que o valor médio de qualquer observável A_H é conservado se $|\psi_0\rangle$ for um autoestado da hamiltoniana! De fato, se $H|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle$ então

$$\frac{d}{dt}\langle\psi_0|A_H|\psi_0\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi_0|(A_H H - H A_H)|\psi_0\rangle = \frac{(E - E)}{i\hbar}\langle\psi_0|A_H|\psi_0\rangle = 0. \quad (7.31)$$

7.3 Simetrias

A existência de leis de conservação está intimamente ligada às simetrias do sistema. Por exemplo, sabemos da Mecânica Clássica que²

- sistemas exibindo simetria de translação espacial, *i.e.* não possuem pontos privilegiados do espaço, apresentam conservação de momento linear;
- sistemas invariantes por translações temporais apresentam conservação de energia;
- sistemas invariantes por rotações exibem conservação de momento angular.

Em Mecânica Quântica também temos essa associação de quantidades conservadas a simetrias do sistema. Para prosseguirmos, definamos mais precisamente o que é uma simetria: *uma transformação que leve uma solução do um sistema a outra solução é dita ser uma simetria*, tanto em Mecânica Clássica como em Mecânica Quântica. Note que as soluções não precisam ser necessariamente idênticas. Por exemplo, o problema de Kepler clássico exhibe a simetria de rotação: se tomarmos uma trajetória elíptica e a rodarmos de um ângulo θ teremos uma outra trajetória possível, a qual em geral não é igual à inicial.

²Para maiores detalhes veja a seção 1.1 do “Quantum Mechanics: Symmetries”, de W. Greiner e B. Müller.

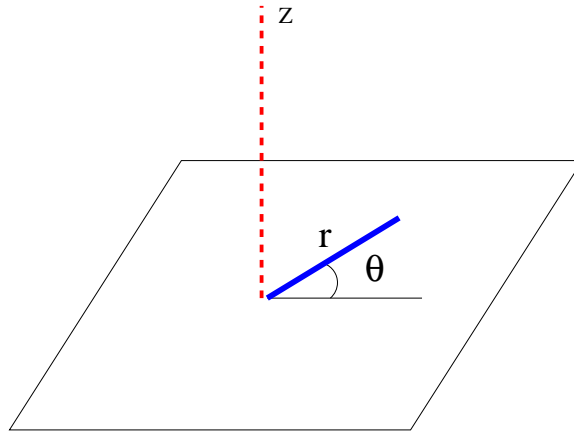


Figura 7.1: Definição da geometria do sistema bidimensional.

Vejam os em um exemplo simples, como as simetrias estão relacionadas às leis de conservação em Mecânica Quântica. Consideremos um sistema bidimensional o qual é invariante por rotações ao redor do eixo z perpendicular ao plano. Utilizando coordenadas polares, vide Figura 1, os estados deste sistema são dados por funções de onda $\psi(r, \theta, t)$. Se o sistema for invariante por rotações temos que

$$\bar{\psi}(r, \theta, t) = \psi(r, \theta + \alpha, t) \quad (7.32)$$

também é solução se $\psi(r, \theta, t)$ o for, *i.e.*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (7.33)$$

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = H\bar{\psi}. \quad (7.34)$$

Nunca é demais destacar que estas duas soluções não são necessariamente idênticas.

A primeira lição que este exemplo nos fornece é que podemos relacionar ψ e $\bar{\psi}$ através de um operador unitário. Para tanto basta expandir $\bar{\psi}$ em série de Taylor em torno de $\alpha = 0$ e reescrever os termos

de forma conveniente:

$$\begin{aligned}
 \bar{\psi}(r, \theta, t) &= \psi(r, \theta + \alpha, t) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \left. \frac{d^n \psi}{d\theta^n} \right|_{\theta} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\alpha \frac{d}{d\theta} \right)^n \psi \\
 &= e^{\alpha \frac{d}{d\theta}} \psi = e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} \psi,
 \end{aligned} \tag{7.35}$$

onde L_z é a terceira componente do momento angular. É fácil mostrar, faça-o, que o operador $U = \exp(i\alpha L_z/\hbar)$ é unitário.

Neste exemplo é fácil ver que a simetria de rotação ao redor do eixo z está associada à conservação do momento angular na direção z . De fato, substituindo (7.35) em (7.34) temos que

$$e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} \psi. \tag{7.36}$$

Agora aplicando $e^{-i\alpha \frac{L_z}{\hbar}}$ à esquerda nos dois membros desta equação segue que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = e^{-i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} H e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} \psi. \tag{7.37}$$

Visto que esta última equação deve ser igual a (7.33) temos que

$$H = e^{-i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} H e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}}, \tag{7.38}$$

que é válida para qualquer valor de α . Derivando esta última expressão com respeito a α e fazendo $\alpha = 0$ conduz a

$$\left. \frac{dH}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = 0 \implies 0 = \frac{i}{\hbar} (H L_z - L_z H). \tag{7.39}$$

Portanto, temos que L_z é conservado já que da última igualdade segue que

$$[H, L_z] = 0. \tag{7.40}$$

7.3.1 Transformações

Neste ponto é interessante analisar como os estados e os observáveis mudam quando fazemos uma transformação em um sistema, a qual

não é necessariamente uma simetria. Iniciemos definindo quais são as transformações que são válidas em Mecânica Quântica. Dada a estrutura da Mecânica Quântica desejamos que as transformações sobre um sistema sejam tais que

1. os valores esperados não sejam modificados pois estes estão associados a possíveis resultados de medidas;

$$\langle A \rangle \implies \langle A' \rangle = \langle A \rangle \quad (7.41)$$

2. os módulos de produtos escalares também devem ficar inalterados já que estes estão associados a probabilidades;

$$|\langle \alpha | \beta \rangle| \implies |\langle \alpha' | \beta' \rangle| = |\langle \alpha | \beta \rangle| \quad (7.42)$$

onde denotamos com uma linha os estados e observáveis após a transformação.

Representemos uma transformação sobre os estados de um sistema por U tal que

$$|\alpha'\rangle = U|\alpha\rangle. \quad (7.43)$$

Para que esta transformação não altere os autovalores de um observável A temos que

$$\begin{aligned} A|a\rangle &= a|a\rangle \implies \\ UA|a\rangle &= Ua|a\rangle \implies \end{aligned} \quad (7.44)$$

$$\begin{aligned} UA|a\rangle &= aU|a\rangle \implies \\ UAU^{-1}U|a\rangle &= aU|a\rangle, \end{aligned} \quad (7.45)$$

onde utilizamos que o operador U é linear com respeito a constantes reais, que são os autovalores de A . Da última igualdade podemos concluir que os autoestados do operador A são transformados em

$$|a'\rangle = U|a\rangle, \quad (7.46)$$

ao passo que o operador associado ao observável A é transformado em

$$A' = UAU^{-1}. \quad (7.47)$$

Estas leis de transformação são as mesmas que obtemos quando fazemos uma mudança de base em um espaço vetorial. Tendo em vista que desejamos que a estrutura da Mecânica Quântica seja preservada o operador U deve ser tal que $U^{-1} = U^\dagger$. Há várias maneiras de ver que isto é verdade. Usando que as médias de observáveis não devem ser modificadas temos que

$$\langle \psi' | A' | \psi' \rangle = \langle \psi | U^\dagger U A U^{-1} U | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger U A | \psi \rangle, \quad (7.48)$$

o que nos conduz a $U^{-1} = U^\dagger$. Esta mesma conclusão poderia ser obtida requerendo que o operador A' seja hermitiano, para qualquer A hermitiano,

$$A'^\dagger = U^{-1\dagger} A U^\dagger = U A U^{-1}. \quad (7.49)$$

Exercício:

Obtenha este resultado a partir de $|\langle \alpha' | \beta' \rangle| = |\langle \alpha | \beta \rangle|$.

Teorema de Wigner

Quando consideremos transformações de um sistema (7.43) e (7.47) e exigimos que a estrutura da Mecânica Quântica seja preservada é possível demonstrar que existem duas possibilidades para o operador U :

1. U é unitário, isto é, $UU^\dagger = 1$ e U é um operador linear

$$U(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1U|\alpha\rangle + c_2U|\beta\rangle.$$

2. U é anti-unitário, isto é, $UU^\dagger = 1$ mas

$$U(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*U|\alpha\rangle + c_2^*U|\beta\rangle.$$

Esta possibilidade acontece quando consideramos a simetria por reversão temporal.

Neste ponto é interessante dar alguns exemplos de transformações associadas a operadores unitários, sugerindo fortemente que o leitor prove que suas expressões estão corretas.

- Como vimos anteriormente, rotações de um ângulo α ao redor do eixo z são dadas por

$$U = e^{i\alpha \frac{L_z}{\hbar}} ;$$

- Translações espaciais por \mathbf{a} , *i.e.* $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}$ são implementadas pelo operador unitário

$$U = e^{i \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}} ,$$

onde \mathbf{p} é o operador momento linear. Note que este operador não só desloca a coordenada de um estado por \mathbf{a} , mas também modifica o *operador posição* segundo $\mathbf{x}' = U \mathbf{x} U^\dagger = \mathbf{x} + \mathbf{a}$.

- Translações temporais por δt são realizadas pelo operador unitário

$$U = e^{-i \frac{H \delta t}{\hbar}} .$$

7.4 Simetrias e Leis de Conservação

Agora estamos em condições de demonstrar que simetrias estão associadas a quantidades conservadas em Mecânica Quântica. Consideremos uma transformação U (unitária) a qual leva soluções da equação de Schrödinger em soluções, isto é satisfaz (7.33) e (7.34). Escrevendo $\bar{\psi} = U\psi$ e substituindo em (7.34) temos que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} &= H \bar{\psi} \quad \implies \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U\psi) &= HU\psi \quad \implies \\ U i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= HU\psi \quad \implies \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= U^{-1} HU\psi . \end{aligned} \tag{7.50}$$

Logo, temos que $H = U^{-1}HU$ o que nos conduz a

$$[U, H] = 0, \quad (7.51)$$

e que os valores médios de U são conservados pela evolução temporal. Em geral, o operador U não é hermitiano, ou seja não está associado a um observável físico, o que aparentemente diminuiria a utilidade desta lei de conservação. Todavia, podemos escrever o operador unitário associado a uma transformação que depende continuamente de um parâmetro α como

$$U = e^{i\alpha G}, \quad (7.52)$$

onde G é um operador hermitiano. Por exemplo, no caso de rotação ao redor do eixo z temos que $G = L_z$, como vimos anteriormente. Substituindo (7.52) em (7.51) e derivando com respeito a α temos que

$$\left. \frac{d}{d\alpha} [U, H] \right|_{\alpha=0} = 0 \implies [G, H] = 0, \quad (7.53)$$

ou seja, G é conservado. Lembre-se que isto é exatamente como o exemplo acima da simetria por rotações em torno do eixo z . Tendo em vista os exemplos de operadores unitários do final da seção anterior, segue que

- sistemas exibindo simetria de translação apresentam a conservação do momento linear;
- sistemas invariantes com respeito a escolha da origem do tempo exibem conservação de energia.

Cumpramos frisar que existem transformações de simetria para as quais o operador unitário associado também é hermitiano. Este é o caso das transformações de paridade.

Paridade

Consideremos, a título de exemplo, um oscilador harmônico unidimensional cuja hamiltoniana é

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2. \quad (7.54)$$

132 **Capítulo 7. Representação de Heisenberg e Simetrias**

Esta hamiltoniana é invariante pela transformação de paridade $x \rightarrow -x$. Esta transformação é implementada pelo operador P tal que

$$\bar{\psi}(x) = P\psi(x) = \psi(-x). \quad (7.55)$$

É fácil verificar que $\bar{\psi}$ é solução da equação de Schrödinger se ψ o for, e conseqüentemente que a paridade é uma simetria do sistema. Para provar este fato basta notar que

$$PV(x)\psi(x) = V(-x)\psi(-x) = V(x)\psi(-x) = V(x)P\psi(x)$$

e também

$$P\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} \psi(-x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P\psi.$$

Logo, $PH\psi = HP\psi$.

Visto que a transformação $x \rightarrow -x$ não pode ser feita continuamente,³ o operador paridade P não pode ser escrito na forma $e^{i\alpha G}$. Mais ainda, o operador P possui as seguintes propriedades:

- P é hermitiano: para ver este fato avaliamos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) P\psi_2(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(-x)$$

fazendo a troca de variável $x \rightarrow -x$ temos que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) P\psi_2(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(-x) \psi_2(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx (P\psi_1)^*(x) \psi_2(x), \end{aligned}$$

o que demonstra que $P^\dagger = P$.

- $P^2 = 1$: de fato

$$P^2\psi(x) = P\psi(-x) = \psi(x),$$

qualquer que seja ψ . Logo, $P^2 = 1$.

- P é unitário já que $PP^\dagger = PP = 1$, onde usamos as propriedades anteriores.

³Para ver isto basta notar que não existe escolha de parâmetros da transformação tal que a transformação seja igual ao operador unidade.

Exercício

Mostre que os autovalores de P são ± 1 .

7.5 Simetrias e Degenerescência

Mostraremos agora que degenerescências estão associadas à existência de quantidades conservadas as quais não podem ser diagonalizadas simultaneamente por não comutarem entre si. Para demonstrarmos este fato, assumamos que existe uma transformação de simetria $U = e^{i\alpha G}$ e que a hamiltoniana do sistema foi diagonalizada simultaneamente com outros operadores os quais não comutam com G . Como G não pode ser diagonalizado juntamente com os outros operadores, temos que os autovetores da hamiltoniana não são em geral autovetores de G . Por exemplo, no caso do átomo de hidrogênio, temos que rotações em torno dos eixos x ou y não comutam com L_z , o que nos leva a identificar G com L_x ou L_y . Note que os estados $|n\ell m\rangle$ não são autoestados de $L_{x(y)}$ exceto para $\ell = 0$.

Escrevamos o problema de autovetores de H na forma

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle.$$

Dado que G e H comutam temos que $G|E_n\rangle$ também é autovetor de H com autovalor E_n :

$$H G|E_n\rangle = G H|E_n\rangle = G E_n|E_n\rangle = E_n G|E_n\rangle.$$

Visto que $|E_n\rangle$ também é autoestado de operadores que não comutam com G é mandatário que existam estados para os quais $G|E_n\rangle$ não é proporcional a $|E_n\rangle$. Se isto não ocorresse, poderíamos diagonalizar G simultaneamente com os outros operadores, o que vai de encontro à nossa hipótese destes operadores não comutarem com G . Logo, $G|E_n\rangle$ é linearmente independente de $|E_n\rangle$ e como estes vetores estão associados ao mesmo autovalor de H (E_n) vemos que existem estados degenerados.

A guisa de ilustração, consideremos um átomo de hidrogênio. Tradicionalmente diagonalizamos H , \mathbf{L}^2 e L_z , sendo que os operadores L_x e

L_y , ou L_{\pm} , não comutam com L_z . Sabemos que a energia dos estados $|n\ell m\rangle$ independe de m , logo sendo degenerados para $\ell \neq 0$. Aqui é fácil ver que o operador associado a simetria não diagonalizada (L_{\pm}) conecta estados com valores diferentes de m e mesmo n e ℓ já que

$$L_{\pm}|n\ell m\rangle \propto |n\ell m \pm 1\rangle .$$

Com isto compreendemos a degenerescência dos estados p , d , etc. Todavia, esta não é toda a história para o átomo de hidrogênio já que os autovalores da energia não dependem de ℓ . Por exemplo, sabemos que os estados $2s$ e $2p$ são degenerados, mas por outro lado estes não podem ser relacionados utilizando apenas os operadores L_{\pm} . Isso significa que o átomo de hidrogênio possui uma simetria adicional, dita acidental, a qual também não comuta com \mathbf{L}^2 . Classicamente, esta simetria adicional está relacionada ao fato das órbitas do átomo clássico serem fechadas e não sofrerem precessão. A quantidade conservada associada a esta simetria extra é o vetor de Runge-Lenz

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} \wedge \mathbf{L} - \mathbf{L} \wedge \mathbf{p}) - \frac{e^2}{r} \mathbf{r} . \quad (7.56)$$