14: Operadores unitários e simetrias

- Exemplos de operadores unitários
- Exercícios
-

As quantidades observáveis (resultados de medidas) aparecem, na mecânica quântica, sob a forma de produtos escalares de estados,

$$(\psi,\phi)=\int dq\psi(q)^*\phi(q)$$

Um caso particular importante é um “elemento de matriz' de um operador $\hat{O}$:

$$\int dq\psi^*(q)\hat{O}\phi(q)$$

Como toda teoria, a mecânica quântica admite transformações “de linguagem”: por exemplo, quando eu descrevo o mesmo fenômeno usando dois sistemas de eixos ortogonais, obtenho descrições distintas do mesmo fenômeno. Essas descrições devem ser equivalentes, já que representam a mesma coisa de pontos-de-vista distintos. É como se eu descrevesse o mesmo fenômeno em inglês e em alemão: as descrições são diferentes, mas têm o mesmo conteúdo.

Como as quantidades físicas são representadas pelos produtos escalares de estados, é importante o estudo dos operadores que conservam os produtos escalares, ou seja, dos operadores $\hat{U}$ que são tais que

$$(\hat{U}\psi,\hat{U}\phi)=(\psi,\phi) \tag{258}$$

ou, mais explicitamente,

$$\int dq\psi(q)^*\phi(q)=\int dq(\hat{U}\psi(q))^*\hat{U}\phi(q) \tag{259}$$

Um operador linear é unitário, por definição, se

$$\hat{U}\hat{U}^+=\hat{U}^+\hat{U}=1 \tag{260}$$

Seja $\hat{U}$ um operador unitário e considere as transformações de funções de onda:

$$\begin{aligned}\psi'(q) &= \hat{U}\psi(q)\\ \phi'(q) &= \hat{U}\phi(q)\end{aligned}$$

Então,

$$\int dq\psi'^*\phi' = \int dq\left(\hat{U}\psi\right)^*\hat{U}\phi = \int dq\psi^*\hat{U}^+\hat{U}\phi = \int dq\psi^*\phi$$

o que mostra que uma transformação implementada por um operador unitário conserva os produtos escalares. Mais detalhadamente, considere o produto escalar

$$\left(\psi, \hat{O}\phi\right) = \int dq\psi^*(q)\hat{O}\phi(q)$$

Sejam

$$\begin{aligned}\psi'(q) &= \hat{U}\psi(q)\\ \left(\hat{O}\phi(q)\right)' &= \hat{U}\left(\hat{O}\phi(q)\right)\end{aligned}$$

Podemos escrever

$$\left(\hat{O}\phi(q)\right)' = \hat{U}\hat{O}\phi(q) = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^+\hat{U}\phi(q) = \left(\hat{U}\hat{O}\hat{U}^\dagger\right)\phi'(q)$$

Logo,

$$\left(\psi', (\hat{O}\phi)'\right) = \int dq\left(\hat{U}\psi(q)\right)^*\hat{U}\hat{O}\hat{U}^+\left(\hat{U}\phi(q)\right) = \int dq\psi^*\hat{O}\phi = \left(\psi, \hat{O}\phi\right)$$

Podemos interpretar este resultado assim: considere as transformações

$$\begin{aligned}\psi \rightarrow \psi' &= \hat{U}\psi\\ \phi \rightarrow \psi' &= \hat{U}\psi\\ \hat{O} \rightarrow \hat{O}' &= \hat{U}\hat{O}\hat{U}^+\end{aligned}$$

Então, temos:

$$\int dq\psi'^*(q)\hat{O}'\phi'(q) = \int dq\psi^*(q)\hat{O}\phi(q)$$

onde $\hat{O}' \equiv \hat{U}\hat{O}\hat{U}^+$ é a transformação de $\hat{O}$ pela ação do operador linear $\hat{U}$. Diz-se que um operador $\hat{O}$ é invariante por uma transformação unitária $\hat{U}$ se

$$\hat{U}\hat{O}\hat{U}^+ = \hat{O}$$

ou, equivalentemente, se

$$\hat{O}\hat{U} = \hat{U}\hat{O} \tag{261}$$

Exemplos de operadores unitários

O leitor verificará sem dificuldade que o operador $\hat{1}$, definido por

$$\hat{1}\psi = \psi$$

é unitário. Para dar exemplos mais ricos, precisaremos definir a exponencial de um operador.

Define-se $e^{\hat{O}}$ assim:

$$e^{\hat{O}} = \hat{1} + \hat{O} + \frac{1}{2!}\hat{O}\hat{O} + \frac{1}{3!}\hat{O}\hat{O}\hat{O} + \dots \tag{262}$$

onde, naturalmente, se pode escrever $\hat{O}^2$ em vez de $\hat{O}\hat{O}$, etc. A ideia é usar a expansão da função exponencial numérica como modelo da expansão do operador. Usando-se esta definição, pode-se demonstrar a importante relação de Baker-Hausdorff-Campbell:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]] + \dots \tag{263}$$

Uma aplicação imediata é esta: para $\hat{B} = 1$, temos

$$e^{\hat{A}}e^{-\hat{A}} = 1$$

pois $[\hat{A},\hat{1}] = 0$. Logo, $e^{-\hat{A}}$ é o operador inverso de $e^{\hat{A}}$.

Considere um operador da forma $e^{i\hat{O}}$, com $\hat{O} = \hat{O}^{+}$, ou seja, hermiteano. Temos então,

$$\left(e^{i\hat{O}}\right)^{+} = e^{-i\hat{O}^{+}} = e^{-i\hat{O}}$$

Logo,

$$\left(e^{i\hat{O}}\right)\left(e^{i\hat{O}}\right)^{+} = 1$$

ou seja, $e^{i\hat{O}}$ é unitário se $\hat{O}$ for hermiteano.

Exemplo: os seguintes operadores são unitários:

$$\begin{aligned} U(\epsilon) &= e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{p_x}} \\ U(\Delta t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} \end{aligned}$$

Chama-se operadores unitários infinitesimais operadores da forma

$$\hat{U} = 1 + i\epsilon\hat{O}$$

com $\hat{O} = \hat{O}^{+}$. Note-se que um operador desse tipo é o truncamento da série que define o operador unitário $e^{i\epsilon\hat{O}}$ que mantém apenas os dois primeiros termos. Ou seja, um operador unitário infinitesimal satisfaz a condição de unitaridade desde que se desprezem termos que contenham potências quadráticas de ϵ ou maiores. Explicitamente, temos, se $\hat{U} = 1 + i\epsilon\hat{O}$, $\hat{U}^+ = 1 - i\epsilon\hat{O}$, e

$$\hat{U}\hat{U}^+ = (1 + i\epsilon\hat{O})(1 - i\epsilon\hat{O}) = 1 + i\epsilon\hat{O} - i\epsilon\hat{O} + \epsilon^2(...) \approx 1$$

Seja $\hat{B}$ um operador invariante por uma transformação implementada pelo operador unitário infinitesimal $1 + \frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{O}$. Então

$$\hat{B} = \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{O}\right)\hat{B}\left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{O}\right) = \hat{B} + \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{O}\hat{B} - \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{B}\hat{O} = \hat{B} + \frac{i\epsilon}{\hbar}[\hat{O}, \hat{B}]$$

Logo, devemos ter $[\hat{O}, \hat{B}] = 0$. Sumarizando:

Seja $\hat{B}$ invariante pela transformação unitária $\hat{U} = e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{O}}$. Então, $[\hat{B}, \hat{O}] = 0$.

Define-se simetria de um sistema com hamiltoniano $\hat{H}$ uma transformação unitária que deixa o hamiltoniano invariante. Seja $\hat{U} = e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{O}}$ uma simetria. Então, por definição, $[\hat{H}, \hat{O}] = 0$. Ora, isto significa que o operador $\dot{\hat{O}} = 0$, ou, em outras palavras,que a quantidade física associada ao operador hermiteano $\hat{O}$ é conservada. Desta forma associamos simetrias a leis de conservação: a cada simetria corresponde uma quantidade conservada. Este resultado, na física clássica, é conhecido como o teorema de Noether.

Exercícios

1.(a)Construa o adjunto do operador $\frac{d^2}{dx^2} - a\exp(ix)$ onde a é um número real.

(b) Mostre que $[\vec{p}, f(\vec{r})] = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} f(\vec{r})$.

2. Os três operadores $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$ são dados por

$$
\begin{aligned}
\hat{A}\psi(x) &= x^3\psi(x) \\
\hat{B}\psi(x) &= x\frac{d\psi}{dx} \\
\hat{C}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{x} u\psi(u)du
\end{aligned}
$$

(i) Calcule $[\hat{A}, \hat{B}]$ e $[\hat{B}, \hat{C}]$.

(ii) Resolva o problema de autovalores

$$\hat{C}\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

exigindo que $\psi(x)$ seja normalizável. Que restrição isto impõe sobre λ?

3. Determine o operador unitário que efetua, sobre a função de onda de um sistema, uma translação espacial $\psi(\vec{r}) \to \psi(\vec{r} + \vec{\epsilon})$, onde $\vec{\epsilon}$ é um "vetor infinitesimal". Usando o fato de que uma sucessão de translações independe da ordem em que são realizadas, demonstre que os operadores de momento $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ e $\hat{p}_z$ comutam. Aproveite para mostrar que esses operadores são hermiteanos, sem calcular qualquer integral.