Capítulo 13

Simetrias discretas

Até agora só consideramos simetrias contínuas, para as quais os operadores que conduzem tais simetrias têm que ser lineares ($U(l) = U(l/2)U(l/2)$). Entretanto, recordando o capítulo 3 vemos que, através do teorema de Wigner (§3.1), uma transformação de simetria deve ser conduzida por um operador U unitário *ou anti-unitário*, tal que o mapeamento $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ seja isomórfico, valendo $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi'\rangle$ (linear) ou $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi'\rangle*$ (anti-linear). Desta forma, a probabilidade de eventos equivalentes nos dois sistemas equivalentes por simetria se preserva, isto é, se $|\Psi\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle$ e $|\Psi'\rangle = \sum_n c'_n|\phi'_n\rangle$ são equivalentes por simetria, $|c_n|^2 = |c'_n|^2$, onde o módulo quadrado faz com que tanto operações lineares quanto anti-lineares satisfaçam o segundo postulado da M.Q..

Por definição, um operador linear L é tal que satisfaz:

$$L(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1 L|\psi_1\rangle + c_2 L|\psi_2\rangle, \tag{13.1}$$

enquanto que um operador anti-linear A satisfaz:

$$A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^* A|\psi_1\rangle + c_2^* A|\psi_2\rangle. \tag{13.2}$$

Nesse capítulo analisaremos as simetrias discretas da M.Q. para as quais é possível utilizar operadores anti-lineares.

13.1 Simetria de inversão do espaço

A transformação de inversão espacial é tal que $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$. Para descrever essa simetria usaremos o operador de **paridade** Π que satisfaz:

$$\Pi\mathbf{Q}\Pi^{-1} = -\mathbf{Q}, \quad \Pi\mathbf{P}\Pi^{-1} = -\mathbf{P}. \tag{13.3}$$

Consequentemente:

$$\Pi\mathbf{L}\Pi^{-1} = \Pi(\mathbf{Q}\times\mathbf{P})\Pi^{-1} = \mathbf{L} \tag{13.4}$$

e, por extensão, vale também para qualquer operador momento angular:

$$\Pi\mathbf{J}\Pi^{-1} = \mathbf{J}. \tag{13.5}$$

Para elucidar se Π é linear ou anti-linear, basta calcular:

$$\begin{aligned}
&[Q_\alpha, P_\alpha] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Pi[Q_\alpha, P_\alpha]\Pi^{-1} = \Pi i \Pi^{-1}\hbar \\
&\Pi Q_\alpha P_\alpha \Pi^{-1} - \Pi P_\alpha Q_\alpha \Pi^{-1} = \Pi i \Pi^{-1}\hbar \\
&Q_\alpha P_\alpha - P_\alpha Q_\alpha = \Pi i \Pi^{-1}\hbar \\
&\Leftrightarrow \Pi i \Pi^{-1} = i,
\end{aligned} \tag{13.6}$$

que será válido apenas se Π for linear. Como duas operações de inversão não mudam nada, temos que $\Pi^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$, de forma que o operador Π^2 só pode diferir da identidade por um fator de fase. Escolhendo, por conveniência, este fator de fase como a unidade, temos que

$$\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger. \tag{13.7}$$

Agora estamos em condição de definir a atuação desse operador em vetores de estado e funções de onda. Começando com $\Pi Q_\alpha|\mathbf{x}\rangle = \Pi x_\alpha|\mathbf{x}\rangle = x_\alpha\Pi|\mathbf{x}\rangle$ e inserindo a relação $\Pi^{-1}\Pi$ vem

$$\Pi Q_\alpha \Pi^{-1}\Pi|\mathbf{x}\rangle = -Q_\alpha\Pi|\mathbf{x}\rangle = -x_\alpha\Pi|\mathbf{x}\rangle, \tag{13.8}$$

como vale que $Q_\alpha|-\mathbf{x}\rangle = -x_\alpha|-\mathbf{x}\rangle$, encontramos:

$$\Pi|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle. \tag{13.9}$$

E para funções de onda temos que:

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle, \tag{13.10}$$

logo:

$$\Pi\psi(\mathbf{x}) = \Pi\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \langle\mathbf{x}|\Pi|\psi\rangle = \langle-\mathbf{x}|\psi\rangle = \psi(-\mathbf{x}). \tag{13.11}$$

Mas como $\Pi^2 = \mathbf{1}$, então Π tem autovalores ± 1, e autofunções tipo:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}), \text{autovalor } +1, \text{ função par;} \tag{13.12}$$

$$\psi(\mathbf{x}) = -\psi(-\mathbf{x}), \text{autovalor } -1, \text{ função ímpar.} \tag{13.13}$$

Exemplo 23 (Momento angular orbital) *Para analisar a atuação de* Π *no momento angular orbital, consideremos a relação válida para harmônicos esféricos:*

$$Y_l^m(\theta,\varphi) \to Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{13.14}$$

então, para uma partícula única que possui autovetor $|l,m\rangle$ *do operador momento angular orbital* $\mathbf{L}$ *obedece a:*

$$\Pi|l,m\rangle = (-1)^l|l,m\rangle. \tag{13.15}$$

Note que para um sistema de múltiplas partículas com mais de um momento angular (§7.7) vale:

$$\Pi|l_1,l_2,L,M\rangle = (-1)^{l_1+l_2}|l_1,l_2,L,M\rangle, \tag{13.16}$$

sendo que $(-1)^{l_1+l_2} \neq (-1)^L$*, ou seja, em geral, não se pode dizer que paridade de um estado com momento angular é determinada pelo valor do momento angular total.*

Exemplo 24 (Momento de dipolo elétrico permanente) *O operador de momento de dipolo elétrico para um sistema de muitas partículas é dado por* $\mathbf{d} = \sum_j q_j \mathbf{Q}_j$ *com* q_j *e* $\mathbf{Q}_j$ *sendo a carga e a posição da j-ésima partícula, respectivamente. E, por causa de* $\mathbf{Q}$ *temos que* $\mathbf{d}$ *possui paridade ímpar* $\Pi\mathbf{d}\Pi^{-1} = -\mathbf{d}$*. Se, na ausência de campo elétrico externo, um estado estacionário* $|\psi\rangle$ *possuir um valor esperado de momento de dipolo não nulo* $\langle\mathbf{d}\rangle = \langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle$*, então o estado é dito possuir um momento de dipolo elétrico permanente ou espontâneo. Calculemos, agora:*

$$\langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle = \langle\psi|\Pi^{-1}\Pi\mathbf{d}\Pi^{-1}\Pi|\psi\rangle = -\langle\psi'|\mathbf{d}|\psi'\rangle, \tag{13.17}$$

e suponhamos que o hamiltoniano do sistema é invariante por paridade:

$$\Pi H \Pi^{-1} = H, \tag{13.18}$$

então vale que $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \to H|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle$*.*

Assim os dois estados $|\psi\rangle$ *e* $|\psi'\rangle = \Pi|\psi\rangle$ *descrevem um estado estacionário com mesma energia, E. Se ambos níveis forem não-degenerados, eles não podem ser independentes, logo deve valer que* $\Pi|\psi\rangle = c|\psi\rangle$ *com a constante* $c = \pm 1$*, os autovalores de* Π*. Com isso encontramos:*

$$\langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle = -\langle\psi'|\mathbf{d}|\psi'\rangle = -c^2\langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle = -\langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle, \tag{13.19}$$

o que é válido se, e somente se, $\langle\psi|\mathbf{d}|\psi\rangle = 0$*. Ou seja, fica provado que se um sistema possui hamiltoniano invariante por paridade e se o estado for não-degenerado, é impossível existir momento de dipolo elétrico permanente nesse estado.*

13.2 Não-conservação de paridade

Se o operador de paridade Π comuta com o hamiltoniano, então os auto-valores de paridade ± 1 são quantidades conservadas. Sob essa condição, um estado de paridade par jamais irá adquirir paridade ímpar e vice-versa.

Durante muito tempo a comunidade científica acreditou que a operação de paridade fosse uma lei fundamental da natureza pois não haviam sido encontrados exemplos de sistemas que violassem a paridade (ou seja, não foram encontrados hamiltonianos que não comutassem com Π). Em outras palavras, essa simetria de paridade significa que se um processo é possível, o processo espelho também será possível, e há diversos exemplos que física que satisfazem a conservação de paridade.

Entretanto, em 1956, um experimento provou que a natureza não obedece invariavelmente a essa simetria. Num experimento de decaimento beta envolvendo a força nuclear fraca, foi possível perceber que dentre dois processos, o real e o espelho, somente um deles acontece, quebrando a conservação de paridade. A força fraca é, por tanto, uma exceção a regra da conservação da paridade. Para maiores detalhes, ver [2].

13.3 Simetria de reversão temporal

O operador T de reversão temporal não deve ser entendido como uma reversão do tempo em si, mas como uma reversão do movimento. Por definição:

$$T\mathbf{Q}T^{-1} = \mathbf{Q}, \tag{13.20}$$

$$T\mathbf{P}T^{-1} = -\mathbf{P}, \tag{13.21}$$

$$T\mathbf{J}T^{-1} = -\mathbf{J}. \tag{13.22}$$

Como fizemos antes (13.6), calculemos:

$$\begin{aligned}
&[Q_\alpha, P_\alpha] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad T[Q_\alpha, P_\alpha]T^{-1} = TiT^{-1}\hbar \\
&TQ_\alpha P_\alpha T^{-1} - TP_\alpha Q_\alpha T^{-1} = TiT^{-1}\hbar \\
&-Q_\alpha P_\alpha + P_\alpha Q_\alpha = TiT^{-1}\hbar \\
&\Leftrightarrow TiT^{-1} = -i.
\end{aligned} \tag{13.23}$$

Logo, T é anti-linear. Para relembrar a definição de anti-linearidade, veja (13.2).

Pela construção do espaço dual dos bras (§1.1.7), a forma direta como fazemos um operador atuar à direita (no ket) ou à esquerda (no bra) não funciona para operadores anti-lineares. Para trabalhar desta forma algumas revisões são necessárias. Por exemplo, a forma $\langle\psi|A|\phi\rangle$ fica indefinida. Para evitar complicação com a notação de Dirac, consideremos que o operador anti-linear atua sempre à direita, ou seja, atua sempre no ket. E por consequência, não faremos uso do adjunto $A^\dagger$.

O exemplo mais simples de operador anti-linear é o operador de *conjugação complexa*, K. Como ele realiza uma operação tipo "complexo conjugado", o resultado depende das fases. Ou seja, diferentemente dos operadores lineares, K não é independente da escolha de base.

Seja um conjunto ortonormal de vetores $\{|n\rangle\}$ e um vetor arbitrário $|\psi\rangle = \sum_n a_n|n\rangle$. O operador de conjugação complexa nessa base, $K_{(n)}$, é definido pela equação:

$$K_{(n)}|\psi\rangle = \sum_n a_n^*|n\rangle. \tag{13.24}$$

Considere, agora, outra base $\{|\nu\rangle\}$ para a qual definimos o operador $K_{(\nu)}$:

$$K_{(\nu)}|\psi\rangle = \sum_\nu a_\nu^*|\nu\rangle. \tag{13.25}$$

Expressando a base $\{|\nu\rangle\}$ em termos da base $\{|n\rangle\}$ teremos:

$$|\nu\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\nu\rangle, \tag{13.26}$$

de forma que:

$$K_{(\nu)}|\psi\rangle = \sum_n \sum_\nu a_\nu^*|n\rangle\langle n|\nu\rangle. \tag{13.27}$$

Essa equação só será igual à equação (13.24) se o produto interno $\langle n|\nu\rangle$ for real para todo ν e n. Isso é suficiente para mostrar que duas construções diferentes de K são, em geral, não equivalentes.

13.3.1 Reversão temporal da equação de Schrödinger

Seja a equação de Schrödinger:

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle, \tag{13.28}$$

Atuando T à esquerda e usando $T^{-1}T$ do lado esquerdo vem:

$$THT^{-1}T|\psi(t)\rangle = Ti\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}T|\psi(t)\rangle. \tag{13.29}$$

Igualmente, podemos escrever:

$$THT^{-1}T|\psi(-t)\rangle = Ti\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(-t)\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}T|\psi(-t)\rangle. \tag{13.30}$$

Note que tanto $T|\psi(t)\rangle$ quanto $T|\psi(-t)\rangle$ são soluções da equação de Schrödinger, de qualquer forma. A solução vem em pares, não é uma consequência de uma operação de simetria. Suponha que H é invariante a T, ou seja, $THT^{-1} = H$. Não há quantidade conservação associada à simetria de inversão temporal.

Até agora comentamos apenas da anti-linearidade de T e de que ele está associado à conjugação complexa. Ainda não obtivemos a forma explícita de T. O principal problema aqui é que a forma explícita de T depende da escolha da base. Vejamos alguns exemplos.

13.3.2 Representação das coordenadas

Na representação das coordenadas, a equação de Schrödinger pode ser escrita como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + W(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t), \tag{13.31}$$

com a conjugação complexa:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + W^*(\mathbf{x})\right]\psi^*(\mathbf{x},t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{x},t). \tag{13.32}$$

Se $W = W^*$, então podemos definir $T = K_0$ tal que $K_0\psi(\mathbf{x},t) = \psi^*(\mathbf{x},t)$, o operador de conjugação complexa para a representação das coordenadas. Nesse caso T é a inversa de si mesmo. Para checar essa forma de T vejamos:

$$T\mathbf{x}T^{-1} = \mathbf{x}, \tag{13.33}$$

$$T\mathbf{P}T{-}1 = T(-i\hbar\nabla)T^{-1} = -\mathbf{P}, \tag{13.34}$$

$$T\mathbf{L}T^{-1} = T(\mathbf{x}\times(-i\hbar\nabla))T^{-1} = -\mathbf{L}, \tag{13.35}$$

o que confirma a atuação de T. Na representação das coordenadas, um vetor arbitrário pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle d^3x, \tag{13.36}$$

tal que:

$$T|\psi\rangle = \int \psi^*(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle d^3x, \tag{13.37}$$

com $T|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$.

13.3.3 Representação de momento

Na representação de momento, um vetor arbitrário pode ser escrito da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle d^3p. \tag{13.38}$$

Como não conhecemos a atuação de T em $|\mathbf{p}\rangle$, precisamos escrever na representação das coordenadas:

$$\begin{aligned} T|\mathbf{p}\rangle &= T\int |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle d^3x = \int T|\mathbf{x}\rangle \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3x, \\ &= \int |\mathbf{x}\rangle \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3x = \int T|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|-\mathbf{p}\rangle d^3x = |-\mathbf{p}\rangle, \end{aligned} \tag{13.39}$$

logo:

$$T|\psi\rangle = \int \psi^*(\mathbf{p})|-\mathbf{p}\rangle d^3p, \quad T|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle. \tag{13.40}$$

13.3.4 Reversão temporal e spin

Por analogia com o momento angular orbital, devemos exigir que S, sob efeito de T, deva ser dado por:

$$T\mathbf{S}T^{-1} = -\mathbf{S}. \tag{13.41}$$

Conforme comentamos, operadores anti-lineares são dependentes da representação escolhida para escrevê-los. A representação usual, conforme comentamos em §7.4, é tal que S_z é diagonal e real, S_x é real e S_y é imaginária.

O fato de S_y ser imaginária destrói a possibilidade de simplesmente usar o operador de conjugação complexa para representar T. Nesse caso a forma explícita do operador de reversão temporal é um pouco mais complicada:

$$T = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0, \tag{13.42}$$

que também envolve uma rotação de π em torno de y.

13.3.5 Reversão temporal ao quadrado

Por construção, $|\psi\rangle$ e $T^2|\psi\rangle$ devem representar o mesmo estado. Por conta disso:

$$T^2|\psi\rangle = c|\psi\rangle, \tag{13.43}$$

tal que $|c| = 1$, logo $c = \pm 1$. Portanto:

$$T^2|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle, \tag{13.44}$$

logo T^2 não é igual à identidade. É possível provar que o operador de reversão temporal ao quadrado satisfaz:

$$T^2 = e^{-i2\pi J_y/\hbar}, \tag{13.45}$$

que é idêntico em forma à rotações de 2π em torno do eixo y:

$$T^2 = R(2\pi). \tag{13.46}$$

13.3.6 Teorema de Kramers

Conforme comentamos na seção anterior, invariância de um hamiltoniano H perante o operador de paridade dá origem a uma quantidade conservada. A invariância de H perante o operador anti-unitário de reversão temporal não gera nenhuma quantidade conservada mas, às vezes, aumenta a degenerescência do sistema.

Para um sistema invariante por reversão temporal, pode acontecer o caso onde $|\psi\rangle$ e $T|\psi\rangle$ são linearmente independentes. Esses são os casos onde é válido que $T^2|\psi\rangle = -|\psi\rangle$, como por exemplo um número ímpar de partículas de spin 1/2. Disso podemos tirar um importante resultado:

Teorema 11 (Teorema de Kramers) *Todo sistema invariante por reversão temporal para o qual vale $T^2|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ só pode apresentar níveis de energia degenerados.*

Esta simetria pode ser quebrada pela adição de termos no hamiltoniano que não são invariantes a T, como $H = \gamma\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$, onde $\mathbf{B}$ é um campo magnético.

13.4 Teorema CPT

Comentamos aqui de duas simetrias discretas muito importantes: a de paridade e a de reversão temporal. Para ambas simetrias apresentamos exemplos onde elas são violadas.

Quando os contra-exemplos à simetria de paridade foram encontrados, muitos cientistas conjecturaram que não existiria nenhum sistema invariante pelo conjunto de transformações ΠT, ou seja, pela transformação sucessiva de paridade e de reversão temporal.

Em 1998, Bender e Boettcher [36] mostraram que um sistema hamiltoniano (mesmo não-hermitiano) invariante pela transformação conjunta ΠT apresentaria espectro real.

A existência dessa possível simetria ΠT trouxe muito alvoroço à comunidade científica, acreditando-se ter encontrado uma espécie de “simetria” definitiva da natureza. Entretanto, em 2009, Guo *et al.* [37] mostraram que é possível existir violação da simetria ΠT em potenciais ópticos (e, mais tarde, outros exemplos foram encontrados). Essa descoberta jogou por terra a possibilidade de uma simetria ΠT absoluta da natureza.

Uma nova simetria mais geral, que já existia há algum tempo, passou a ser alvo de interesse da comunidade científica. Essa simetria, conhecida como simetria CPT[1], envolve uma nova simetria discreta: a conjugação de carga.

A grosso modo, a simetria de conjugação de carga consiste em trocar partículas de carga positiva por partículas de carga negativa, e vice-versa. Também podemos entender a conjugação de carga como sendo a troca de todas as partículas por suas respectivas antipartículas. Assim como as outras duas, a simetria de conjugação de carga também era violada para algumas interações fortes.

Dessa construção das transformações CPT surgiu o importante resultado:

Teorema 12 (Teorema CPT) *Uma teoria de campos que é invariante pelo grupo de Lorentz próprio também será invariante pela simetria CPT.*

Esse teorema, embora pareça inocente, é bastante poderoso. Ele permite, por exemplo, estabelecer diversas quantidades conservadas de uma dada teoria. Embora seja enunciado para teorias de campos (a teoria que quantiza os campos e não apenas as partículas) também nos permite entender sua importância em mecânica quântica.

O comentário original sobre esse teorema pode ser encontrado em [38]. Para uma demonstração poderosa desse teorema, num cenário bastante geral usando um argumento inteligente de Pauli, sugerimos [39]. Um artigo de revisão interessante que comenta sobre a importância desse teorema pode ser encontrado em [40].

A demonstração original do teorema CPT e sua primeira introdução à comunidade científica, num âmbito completamente teórico, foi publicada há mais de 50 anos. Entretanto, sua importância científica cresceu com a demonstração da violação da simetria ΠT, demonstrada em 2009, e da violação da simetria de conjugação de carga. Até o momento não foi encontrado nenhum sistema físico que viole as três transformações discretas CPT, que por isso é considerada hoje uma “simetria definitiva” da natureza (até que provem o contrário).

[1]Em muitos textos, a transformação de paridade é designada por P em vez de Π, que usamos aqui para evitar confusão com o momento linear

13.5 Exercícios

Exercício 13.1 *Prove as equações* (13.42) *e* (13.45).

Exercício 13.2 *Resolva os exercícios do livro do Ballentine [2].*