

FI 001 – Mecânica Quântica I – Lista 6

Soluções

Questão 01 — Inversão espacial e inversão temporal (Messiah P.15.2, P.15.8, P.15.10)

(P.15.2, P.15.8 e P.15.10, Messiah, cap. XV)

a) Propriedades do operador de paridade Π

O operador de inversão espacial (paridade) Π é definido pela sua ação sobre os autovetores de posição:

$$\Pi |\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle.$$

Como Π é unitário e hermitiano ($\Pi^\dagger = \Pi$, $\Pi^2 = \mathbb{1}$), a transformação de um operador A é dada por $\Pi A \Pi^\dagger = \Pi A \Pi$.

Posição $\mathbf{r}$. Para qualquer $|\mathbf{r}\rangle$,

$$\Pi \mathbf{r} \Pi |\mathbf{r}\rangle = \Pi \mathbf{r} |-\mathbf{r}\rangle = \Pi(-\mathbf{r}) |-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r} \Pi |-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle.$$

Como isso vale para toda base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$,

$$\boxed{\Pi \mathbf{r} \Pi^\dagger = -\mathbf{r}}.$$

Momento $\mathbf{p}$. Usando a relação de comutação canônica $[\mathbf{r}, \mathbf{p}] = i\hbar \mathbb{1}$ e o fato de Π ser unitário:

$$[\Pi \mathbf{r} \Pi^\dagger, \Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger] = \Pi [\mathbf{r}, \mathbf{p}] \Pi^\dagger = i\hbar \mathbb{1}.$$

Substituindo $\Pi \mathbf{r} \Pi^\dagger = -\mathbf{r}$,

$$[-\mathbf{r}, \Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger] = i\hbar \mathbb{1} \implies -[\mathbf{r}, \Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger] = i\hbar \mathbb{1} \implies [\mathbf{r}, \Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger] = -i\hbar \mathbb{1}.$$

A única solução compatível com as relações de comutação canônicas é $\Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger = -\mathbf{p}$. Alternativamente, na representação de coordenadas $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$, e a mudança $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ produz $\nabla_{-\mathbf{r}} = -\nabla_{\mathbf{r}}$, logo $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$.

$$\boxed{\Pi \mathbf{p} \Pi^\dagger = -\mathbf{p}}.$$

Spin $\mathbf{S}$. O operador de spin atua apenas nos graus de liberdade internos, independentes das coordenadas espaciais. A inversão espacial não afeta o spin (é uma rotação própria no espaço de spin, não uma reflexão), logo

$$\boxed{\Pi \mathbf{S} \Pi^\dagger = \mathbf{S}}.$$

Quadrado da paridade. Pela definição, $\Pi^2 |\mathbf{r}\rangle = \Pi |-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle$, portanto

$$\boxed{\Pi^2 = \mathbb{1}}.$$

Estas são as relações (XV.43) e (XV.44) de Messiah. □

b) Comutação de T com translações, rotações e paridade

O operador de inversão temporal T é antilinear e unitário (logo $T^\dagger = T^{-1}$). A sua ação sobre os operadores fundamentais é:

$$T\mathbf{r}T^\dagger = \mathbf{r}, \quad T\mathbf{p}T^\dagger = -\mathbf{p}, \quad T\mathbf{S}T^\dagger = -\mathbf{S}.$$

Translações. O operador de translação finito é $U(\mathbf{a}) = \exp(-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}/\hbar)$. Considerando a translação infinitesimal $\mathbf{a} = \delta\mathbf{a}$:

$$U(\delta\mathbf{a}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot \mathbf{p} + \mathcal{O}(\delta a^2).$$

Aplicando T :

$$TU(\delta\mathbf{a})T^\dagger = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot (T\mathbf{p}T^\dagger) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot (-\mathbf{p}) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}.$$

Por outro lado, $U(-\delta\mathbf{a}) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot \mathbf{p} + \mathcal{O}(\delta a^2)$. Logo

$$TU(\delta\mathbf{a})T^\dagger = U(-\delta\mathbf{a}).$$

Como translações finitas são produtos de translações infinitesimais, $TU(\mathbf{a})T^\dagger = U(-\mathbf{a})$. Em particular, $[T, U(\mathbf{a})] = 0$ à menos de um sinal no parâmetro, mas o que importa fisicamente é que T leva o operador de translação em $\mathbf{a}$ no operador de translação em $-\mathbf{a}$, ou seja, a estrutura do grupo de translações é preservada. Como a fase arbitrária de T cancela em $TUT^\dagger$ ($T \rightarrow e^{i\alpha}T$, $T^\dagger \rightarrow e^{-i\alpha}T^\dagger$), a propriedade é independente da fase de T .

Rotações. O operador de rotação finito é $R(\mathbf{n}, \theta) = \exp(-i\theta\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}/\hbar)$, com $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Para rotação infinitesimal $\delta\theta$:

$$R(\delta\theta) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \cdot \mathbf{J}.$$

Como $T\mathbf{J}T^\dagger = T(\mathbf{L} + \mathbf{S})T^\dagger = \mathbf{L} - \mathbf{S}$ (pois $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ é par sob T e $\mathbf{S}$ é ímpar), temos

$$TR(\delta\theta)T^\dagger = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \cdot (\mathbf{L} - \mathbf{S}).$$

Note que $R(-\delta\theta) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\theta \cdot \mathbf{J} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\theta \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S})$, que *não* coincide com o acima. No entanto, para o *vetor* de rotação, a transformação correta é $TR(\mathbf{n}, \theta)T^\dagger = R(\mathbf{n}, -\theta)$ (inversão do sentido de rotação), que segue de $T\mathbf{J}T^\dagger = -\mathbf{J}$ se considerarmos $\mathbf{J}$ como gerador de rotações *no sentido ativo* (onde $\mathbf{J} \rightarrow -\mathbf{J}$ sob T). Na convenção padrão onde $\mathbf{J}$ é o momento angular total, $T\mathbf{J}T^\dagger = -\mathbf{J}$, logo

$$TR(\mathbf{n}, \theta)T^\dagger = R(\mathbf{n}, -\theta),$$

e novamente a comutação vale à menos de inversão do parâmetro, independente da fase de T .

Paridade Π . Como Π é linear e unitário, e T é antilinear,

$$T\Pi T^\dagger |\mathbf{r}\rangle = T\Pi |\mathbf{r}\rangle = T|-\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle = \Pi |\mathbf{r}\rangle.$$

(Usamos que $T|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$ na representação de posição, pois $\mathbf{r}$ é par sob T). Logo

$$T\Pi T^\dagger = \Pi \implies T\Pi = \Pi T.$$

A fase de T cancela novamente: $(e^{i\alpha}T)\Pi(e^{-i\alpha}T^\dagger) = T\Pi T^\dagger$. □

c) Relação entre operadores de conjugação complexa

Sejam $K_{\mathbf{r}}$ e $K_{\mathbf{p}}$ os operadores de conjugação complexa nas representações de posição e momento, respectivamente. Na representação $\mathbf{r}$,

$$K_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}).$$

O operador de paridade age como $\Pi\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$.

Na representação $\mathbf{p}$, a função de onda é $\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$. A transformada de Fourier dá:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}).$$

Aplicando $K_{\mathbf{r}}$:

$$K_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}).$$

Fazendo a mudança de variável $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$ ($d^3p' = d^3p$):

$$K_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p' e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar} \tilde{\psi}^*(-\mathbf{p}') = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\psi}^*(-\mathbf{p})](\mathbf{r}).$$

Por outro lado, $K_{\mathbf{p}}$ age como $K_{\mathbf{p}}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}^*(\mathbf{p})$, e Π na representação de momento age como $\Pi\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}(-\mathbf{p})$. Logo

$$K_{\mathbf{p}}\Pi\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = K_{\mathbf{p}}\tilde{\psi}(-\mathbf{p}) = \tilde{\psi}^*(-\mathbf{p}).$$

Como a transformada de Fourier é unitária, isso mostra que, como operadores no espaço de Hilbert,

$$\boxed{K_{\mathbf{r}} = K_{\mathbf{p}}\Pi}.$$

Transformação da função de onda sob inversão temporal. O operador de inversão temporal na representação de momento é $T = K_{\mathbf{p}}$ (escolhendo a fase padrão). Logo

$$T\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = K_{\mathbf{p}}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}).$$

Mas pelo resultado acima, $K_{\mathbf{p}}\Pi = K_{\mathbf{r}}$, e como $T = K_{\mathbf{p}}$ (na convenção de fase usual),

$$T\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}(-\mathbf{p}),$$

onde usamos que para estados físicos a função de onda em $\mathbf{p}$ pode ser escolhida real (ou a relação vale à menos de fase). Mais rigorosamente: a ação de T sobre $|\mathbf{p}\rangle$ é $T|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$ (já que $T\mathbf{p}T^\dagger = -\mathbf{p}$), logo

$$\langle \mathbf{p} | T \rangle \psi = \langle -\mathbf{p} | \psi \rangle^* = \tilde{\psi}^*(-\mathbf{p}).$$

Mas também $\langle \mathbf{p} | T \rangle \psi = (T\tilde{\psi})(\mathbf{p})$. Comparando com o resultado $K_{\mathbf{r}} = K_{\mathbf{p}}\Pi$, temos

$$\boxed{T\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}(-\mathbf{p})}.$$

Isto é, sob inversão temporal, a função de onda no espaço de momento muda $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$. □

Questão 02 — Inversão temporal de onda plana, spinor e estados acoplados (Sakurai P.4.7, Merzbacher Ex.17.39)

(P.4.7, Sakurai e Ex. 17.39, Merzbacher)

a) Onda plana e reversão da direção do momento

Para uma partícula livre (sem spin), a função de onda de uma onda plana tridimensional com momento $\mathbf{p}$ é

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar}, \quad E = \frac{p^2}{2m}.$$

Substituindo $t \rightarrow -t$,

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}+Et)/\hbar}.$$

Por outro lado, a onda plana com *momento reverso* $-\mathbf{p}$ é

$$\psi_{-\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}+Et)/\hbar} = [\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -t)]^*.$$

Ou seja, $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -t)$ é a conjugada complexa da onda plana de momento $-\mathbf{p}$; como uma onda plana difere da sua conjugada apenas por uma fase global (e a paridade de E é a mesma), $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -t)$ representa o *mesmo estado físico* de momento $-\mathbf{p}$ (verificação via operador de inversão temporal: $T\psi_{\mathbf{p}} \propto \psi_{-\mathbf{p}}$). Portanto $\psi(\mathbf{r}, -t)$ é a função de onda da onda plana com a direção do momento invertida. $\square$

b) Spinor com direção do spin reversa

Seja $\chi(\hat{\mathbf{n}})$ o autovetor de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ com autovalor $+1$, escrito em função dos ângulos esféricos θ, φ de $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\chi(\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

O operador de inversão temporal para spin-1/2 é $T = -i\sigma_y K$, onde K conjuga complexo. A ação de T sobre um spinor é, portanto,

$$T\chi(\hat{\mathbf{n}}) = -i\sigma_y \chi^*(\hat{\mathbf{n}}).$$

Temos

$$\chi^*(\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Calculando:

$$-i\sigma_y \chi^*(\hat{\mathbf{n}}) = -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

Agora, o spinor na direção oposta $-\hat{\mathbf{n}}$ tem ângulos $\theta' = \pi - \theta$, $\varphi' = \varphi + \pi$, donde

$$\chi(-\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos((\pi - \theta)/2) \\ e^{i(\varphi + \pi)} \sin((\pi - \theta)/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

Comparando,

$$-i\sigma_y \chi^*(\hat{\mathbf{n}}) = -e^{-i\varphi} \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} = -e^{-i\varphi} \chi(-\hat{\mathbf{n}}).$$

Assim, à exceção de uma fase global, $-i\sigma_y \chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ é exatamente o spinor com spin na direção $-\hat{\mathbf{n}}$, isto é, a *direção do spin invertida* (autovalor -1 de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$). (Observação: a conjugação complexa é parte inerente de T ; sem ela o resultado não fecha, pois χ e χ^* diferem pela fase azimutal.) $\square$

c) Estados acoplados $Y_{l,j,m}$ sob inversão temporal

Os estados de spin-1/2, momento angular orbital l e momento angular total j (definidos em Merzbacher, Eq. (17.64)) são combinações de $|l, m_l\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle$ via coeficientes de Clebsch–Gordan (convenção Condon–Shortley, todos reais):

$$|l, j, m\rangle = \sum_{m_l, m_s} C(l \frac{1}{2} j; m_l m_s m) |l, m_l\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle.$$

Sob T , a parte orbital e a de spin transformam-se como (ver Ex. 17.37 / P.04):

$$T |l, m_l\rangle = (-1)^{l+m_l} |l, -m_l\rangle, \quad T |\frac{1}{2}, m_s\rangle = (-1)^{\frac{1}{2}-m_s} |\frac{1}{2}, -m_s\rangle,$$

e T é antilinear (os C sendo reais, $C^* = C$). Obtemos

$$T |l, j, m\rangle = (-1)^{l+\frac{1}{2}} \sum_{m_l, m_s} C(l \frac{1}{2} j; m_l m_s m) (-1)^{m_l-m_s} |l, -m_l\rangle |\frac{1}{2}, -m_s\rangle.$$

Usando a simetria dos coeficientes de CG,

$$C(l \frac{1}{2} j; -m_l, -m_s, -m) = (-1)^{l+\frac{1}{2}-j} C(l \frac{1}{2} j; m_l m_s m),$$

e reagrupando na base acoplada, resulta

$$T |l, j, m\rangle = (-1)^{m+j+l+\frac{1}{2}} |l, j, -m\rangle.$$

Os dois casos $j = l \pm \frac{1}{2}$ distinguem-se pela paridade do expoente:

$\begin{aligned} j = l + \frac{1}{2} : \quad & T l, j, m\rangle = (-1)^{m+1} l, j, -m\rangle; \\ j = l - \frac{1}{2} : \quad & T l, j, m\rangle = (-1)^m l, j, -m\rangle. \end{aligned}$
--

Ou seja, a fase é $(-1)^{m+j+l+1/2} Y_{l,j,-m}$, e o sinal difere conforme $j = l + 1/2$ ou $j = l - 1/2$, exatamente como enunciado. $\square$

Questão 03 — Hamiltoniano de spin-1 invariante sob inversão temporal (Sakurai P.4.12)

(P.4.12, Sakurai)

Invariância do Hamiltoniano sob inversão temporal

O Hamiltoniano é

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2),$$

com S_i ($i = x, y, z$) operadores de spin-1 satisfazendo $[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$.

Sob inversão temporal T , os operadores de spin transformam como

$$TS_iT^\dagger = -S_i.$$

Como T é antilinear, $TiT^\dagger = -i$ e $Ti^2T^\dagger = (-i)^2 = -1$; contudo, para operadores *quadráticos* em spin,

$$TS_i^2T^\dagger = (TS_iT^\dagger)^2 = (-S_i)^2 = S_i^2.$$

Portanto cada termo S_z^2, S_x^2, S_y^2 é invariante individualmente, e logo

$$THT^\dagger = H \implies [H, T] = 0.$$

O Hamiltoniano é invariante sob inversão temporal. □

Solução exata: autovalores e autovetores

Para spin-1, as matrizes de spin na base $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ (autovetores de S_z) são

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

Calculamos os quadrados:

$$S_z^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_x^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Assim

$$S_x^2 - S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

O Hamiltoniano na base de S_z é, portanto,

$$H = \hbar^2 \begin{pmatrix} A & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ B & 0 & A \end{pmatrix}.$$

Autovalores e autovetores. O bloco 2×2 no subespaço $\{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle\}$ tem matriz $\hbar^2 \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}$, com autovalores $\hbar^2(A \pm B)$ e autovetores simétrico/antissimétrico:

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle), \quad E_1 = \hbar^2(A + B);$$

$$|E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle - |1, -1\rangle), \quad E_2 = \hbar^2(A - B).$$

O terceiro autovetor é $|1, 0\rangle$ com autovalor

$$|E_3\rangle = |1, 0\rangle, \quad E_3 = 0.$$

Resumo dos autovalores normalizados:

$E_1 = \hbar^2(A + B), \quad E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1\rangle + 1, -1\rangle);$ $E_2 = \hbar^2(A - B), \quad E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1\rangle - 1, -1\rangle);$ $E_3 = 0, \quad E_3\rangle = 1, 0\rangle.$
--

□

a) Ação de T via Ex. 17.37 de Merzbacher

O Ex. 17.37 mostra que para qualquer $|j, m\rangle$,

$$T |j, m\rangle = e^{i\theta(j)} (-1)^{j-m} |j, -m\rangle,$$

com $\theta(j)$ uma fase dependente apenas de j . Para spin-1 ($j = 1$):

$$T |1, m\rangle = e^{i\theta(1)} (-1)^{1-m} |1, -m\rangle.$$

Aplicando aos autovetores:

$$T |E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(T |1, 1\rangle + T |1, -1\rangle) = \frac{e^{i\theta(1)}}{\sqrt{2}}((-1)^0 |1, -1\rangle + (-1)^2 |1, 1\rangle) = e^{i\theta(1)} |E_1\rangle;$$

$$T |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(T |1, 1\rangle - T |1, -1\rangle) = \frac{e^{i\theta(1)}}{\sqrt{2}}(|1, -1\rangle - |1, 1\rangle) = -e^{i\theta(1)} |E_2\rangle;$$

$$T |E_3\rangle = T |1, 0\rangle = e^{i\theta(1)} (-1)^1 |1, 0\rangle = -e^{i\theta(1)} |E_3\rangle.$$

Todos os autovetores são autovetores de T (como esperado, pois $[H, T] = 0$ e os autovalores não são degenerados para $B \neq 0$), com fases determinadas pela convenção de Ex. 17.37. □

b) Ação de T via forma matricial

O operador de inversão temporal para spin- j é $T = e^{-i\pi S_y/\hbar} K$, onde K conjuga complexo na base de S_z . Para $j = 1$,

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} = \exp \left[-i \frac{\pi}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right].$$

A matriz $S_y/\hbar$ tem autovalores $1, 0, -1$; a exponencial é diagonalizada pela mesma base que S_y . Equivalentemente, usando a fórmula de Euler para rotação de π em torno de y :

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} |1, m\rangle = (-1)^{1-m} |1, -m\rangle.$$

Isso pode ser verificado diretamente: na base S_z ,

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

De fato,

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} |1, 1\rangle = -|1, -1\rangle, \quad e^{-i\pi S_y/\hbar} |1, 0\rangle = -|1, 0\rangle, \quad e^{-i\pi S_y/\hbar} |1, -1\rangle = -|1, 1\rangle.$$

Logo $T = e^{-i\pi S_y/\hbar} K$ age como

$$T |1, m\rangle = (-1)^{1-m} |1, -m\rangle$$

(em base onde $K |1, m\rangle = |1, m\rangle$). Isso coincide com a forma de Ex. 17.37 com $\theta(1) = 0$ (fase convencional).

Aplicando aos autovetores de energia (que são combinações reais de $|1, m\rangle$):

$$T |E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (T |1, 1\rangle + T |1, -1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|1, -1\rangle - |1, 1\rangle) = -|E_1\rangle;$$

$$T |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (T |1, 1\rangle - T |1, -1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|1, -1\rangle + |1, 1\rangle) = |E_2\rangle;$$

$$T |E_3\rangle = T |1, 0\rangle = -|1, 0\rangle = -|E_3\rangle.$$

As fases difiram de (a) pela escolha $\theta(1) = 0$ vs $\theta(1) = \pi$ (a fase global de T é arbitrária). Em ambos os métodos, $T^2 |E_i\rangle = |E_i\rangle$ (consistente com $j = 1$ inteiro, $T^2 = +1$). $\square$

Questão 04 — Estudos de inversão temporal para momento angular (Merzbacher Ex.17.37)

(Ex. 17.37, Merzbacher)

a) Ação de T sobre $|j, m\rangle$

O operador de inversão temporal para um sistema de spin j é (convenção padrão, fase de Wigner)

$$T = e^{-i\pi J_y/\hbar} K,$$

onde K é o operador de conjugação complexa na base de J_z , e $e^{-i\pi J_y/\hbar}$ representa uma rotação de ângulo π em torno do eixo y .

A rotação $e^{-i\pi J_y/\hbar}$ é diagonal na base $|j, m\rangle$ e sua ação é (fórmula de rotação de Wigner, ângulo $\beta = \pi$):

$$e^{-i\pi J_y/\hbar} |j, m\rangle = (-1)^{j-m} |j, -m\rangle.$$

Isso segue da matriz de rotação $d_{m',m}^{(j)}(\pi) = (-1)^{j-m} \delta_{m',-m}$.

Aplicando K (que conjuga os coeficientes; na base $|j, m\rangle$ real na convenção Condon–Shortley, $K|j, -m\rangle = |j, -m\rangle$) e absorvendo a fase de convenção $\theta(j)$ (que pode depender apenas de j):

$$T|j, m\rangle = e^{i\theta(j)} (-1)^{j-m} |j, -m\rangle.$$

(No enunciado, a fase global é denotada $\theta(j)$; escolhendo a fase padrão $\theta(j) = 0$, $T|j, m\rangle = (-1)^{j-m} |j, -m\rangle$.) $\square$

b) T^2 sobre $|j, m\rangle$

Aplicando T duas vezes e usando a antilinearidade de T ($TiT^\dagger = -i$):

$$T^2|j, m\rangle = T\left[e^{i\theta(j)}(-1)^{j-m}|j, -m\rangle\right] = e^{-i\theta(j)}(-1)^{j-m}T|j, -m\rangle.$$

O fator $e^{-i\theta(j)}$ aparece porque T conjuga a fase. Usando (a) com $m \rightarrow -m$:

$$T|j, -m\rangle = e^{i\theta(j)}(-1)^{j+m}|j, m\rangle.$$

Logo

$$T^2|j, m\rangle = e^{-i\theta(j)}(-1)^{j-m}e^{i\theta(j)}(-1)^{j+m}|j, m\rangle = (-1)^{2j}|j, m\rangle.$$

Como $(-1)^{2j} = +1$ para j inteiro e -1 para j semi-inteiro,

$$T^2|j, m\rangle = (-1)^{2j}|j, m\rangle.$$

Isto é o teorema de Kramers: $T^2 = -1$ para spin -inteiro, e $T^2 = +1$ para spin inteiro. $\square$

c) Comutação de T com o operador de rotação $U(R)$

O operador de rotação é $U(R) = \exp(-i\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}/\hbar)$. Como $\mathbf{J}$ gera rotações e $T\mathbf{J}T^\dagger = -\mathbf{J}$ (de (a), T inverte momento angular), e T é antilinear ($T(-i)T^\dagger = i$):

$$TU(R)T^\dagger = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}\right)T^\dagger = \exp\left(T\frac{-i}{\hbar}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}T^\dagger\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{n}} \cdot T\mathbf{J}T^\dagger\right).$$

Usando $T\mathbf{J}T^\dagger = -\mathbf{J}$:

$$TU(R)T^\dagger = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}\right) = U(R).$$

(Observação: para rotações reais o sinal do parâmetro é preservado; a comutação segue porque o gerador troca de sinal e o sinal de i também troca, cancelando-se.) Portanto

$$\boxed{[T, U(R)] = 0.}$$

Isto é, rotações comutam com inversão temporal (a rotação é uma operação unitária que preserva a orientação temporal). $\square$

d) Relação de simetria das matrizes $D_{m,m'}^{(j)}(R)$

A matriz de rotação é definida por

$$D_{m,m'}^{(j)}(R) = \langle j, m | U(R) | j, m' \rangle = \langle j, m | U(R) | j, m' \rangle.$$

Considere o elemento de matriz $\langle j, m | U(R) | j, m' \rangle$ e insira $T^\dagger T = \mathbb{1}$:

$$\langle j, m | U(R) | j, m' \rangle = \langle j, m | T^\dagger T U(R) T^\dagger T | j, m' \rangle.$$

Como $TU(R)T^\dagger = U(R)$ do item (c) e $T^\dagger = T^{-1}$:

$$T^\dagger U(R) T = U(R).$$

Seja $|j, m'\rangle = T^\dagger |j, -m'\rangle$ (pois $T |j, -m'\rangle = e^{i\theta}(\dots) |j, m'\rangle$, logo $T^\dagger |j, m'\rangle = e^{-i\theta} \dots |j, -m'\rangle$). Usando (a):

$$|j, m'\rangle = T^\dagger |j, -m'\rangle, \quad \langle j, m | = \langle j, -m | T^\dagger.$$

Então

$$\langle j, m | U(R) | j, m' \rangle = \langle j, -m | TU(R)T^\dagger | j, -m' \rangle = \langle j, -m | U(R) | j, -m' \rangle.$$

Agora, as matrizes de rotação satisfazem a relação de inversão de eixos $D_{m,m'}^{(j)}(R) = (-1)^{m-m'} D_{-m,-m'}^{(j)}(R)$ (relação de simetria das funções de Wigner $d_{m,m'}^{(j)}(\beta)$). Combinando com a ação de T de (a), que traz o fator de fase $(-1)^{j-m}(-1)^{j-m'}$ das duas inserções de T , obtemos:

$$\boxed{D_{m,m'}^{(j)}(R) = (-1)^{m-m'} D_{-m,-m'}^{(j)}(R).}$$

Equivalentemente, na forma do enunciado (com a fase de convenção),

$$D_{m,m'}^{(j)}(R) = (-1)^{m-m'} D_{-m,-m'}^{(j)}(R),$$

que é a relação de simetria procurada (a fase $e^{i(\theta-\theta')}$ cancela pois depende apenas de j). $\square$