

Trabalho de Conclusão de Curso - Monografia
O Problema de Kepler e do Átomo de Hidrogênio via
Simetrias

Autor: Alexandre Kodato D’Incao

Orientador: Esmerindo de Sousa Bernardes

Curso: Bacharelado em Física

São Carlos, Junho 2018

Resumo

O trabalho que segue tem como objetivo introduzir a teoria de grupos para a solução de um dos problemas mais emblemáticos da física: o átomo de Hidrogênio não relativístico. Esse foi o caminho adotado por Pauli para conseguir o resultado da energia quantizada que, outrora, Schrödinger encontrou através de sua equação de onda. Além do interesse histórico atrás dessa exploração, temos também que salientar a importância da teoria de grupos na física, destacando o papel dos grupos de Lie e suas álgebras associadas. A solução do átomo de Hidrogênio por esse viés está pautada na ideia de que a invariância de um hamiltoniano sob a ação de um grupo implica em degenerescências e, desse modo, os N^2 estados degenerados desse átomo é um resultado maior daquele esperado pelo grupo de rotações em três dimensões $SO(3)$, o grupo de simetria de um potencial do tipo κ/r , característico do problema das órbitas de Kepler bem como da força coulombiana. Assim sendo, um grupo maior deve ser responsável pela geração das degenerescências: esse grupo existe e é o grupo dinâmico de simetria $SO(4)$, de “rotações” em quatro dimensões. Os geradores desse grupo são dois trivetores: o momento angular e o vetor Laplace-Runge-Lenz. Este é, corriqueiramente, derivado em mecânica clássica pois serve como um parâmetro de estudo do formato de uma órbita mas, pouco fala-se sobre a sua importância como gerador de rotações em quatro dimensões e, por conta disso, sua derivação e estudo são focos do trabalho e parte disso será feita com o formalismo clássico e outra no formalismo quântico. Após isso, vamos brevemente comen-

tar como utilizar a noção de que estamos no \mathbb{R}^4 para reinterpretar a equação de Schrödinger do átomo de Hidrogênio nesse espaço, bem como sua dinâmica.

Sumário

1	Introdução	2
2	Mecânica Clássica	2
2.1	O problema de Kepler	2
2.2	Parênteses de Poisson	4
3	Átomo de Hidrogênio	5
3.1	Introdução	5
3.2	Simetrias e degenerescência	6
3.3	Dinâmica em 4-D	10
3.4	A Equação de Schrödinger	11
4	Conclusão	13
A	Operador L como gerador de rotações	13
B	Projeções Estereográficas	14
C	Cálculo de Parênteses de Poisson	15
C.1	Cálculos Sem Computação Algébrica	16
C.2	Cálculos Com <i>Mathematica</i>	17

1 Introdução

Nosso maior objetivo será encontrarmos a energia quantizada do átomo de Hidrogênio, abrindo mão da equação de Schrödinger, indo por um caminho que explora a teoria de grupos. Para tanto, precisaremos levantar alguns análogos da mecânica clássica no mundo quântico, o que nos leva a revisitar o problema de Kepler e à definição do vetor Laplace-Runge-Lenz. A conexão completa desses dois olhares da física[2] requer que tratemos dos princípios mais fundamentais dos grupos de Lie[8][6], das álgebras de Lie e suas estruturas.

O caminho adotado por nós tem também uma importância histórica por ser o mesmo trilhado por Pauli quando ele resolveu o átomo de Hidrogênio paralela e independentemente de Schrödinger mas, essa não é a única importância. Trata-se de uma aplicação dos grupos de Lie e suas álgebras para a resolução de um problema de física.

Levaremos sempre no nosso texto a ideia de que simetrias implicam em degenerescências, o que já nos faz questionar o resultado de N^2 estados degenerados que encontramos quando resolvemos o átomo de Hidrogênio pois esse valor é maior do gerado pelo grupo de rotações em três dimensões $SO(3)$ que claramente não deve variar o hamiltoniano do Hidrogênio. Isso nos faz pensar que pode existir um grupo maior que o $SO(3)$ que englobe todas as N^2 degenerescências. Esse grupo é o $SO(4)$, grupo dinâmico de simetrias, que recebe esse nome por surgir em um contexto dinâmico específico: a força central de módulo κ/r^2 , tanto do campo coulombiano quanto do campo gravitacional. Após a exposição mais clara dessas derivações,

veremos como a estrutura desse grupo se comporta e como ela nos introduz, de uma maneira quase natural, à energia quantizada do átomo de Hidrogênio

$$E_n = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad \text{com } \kappa = e^2/4\pi\epsilon_0. \quad (1)$$

2 Mecânica Clássica

2.1 O problema de Kepler

Daqui para frente, o problema das órbitas de Kepler será referência a uma força central que diminua com o quadrado da distância, a menos de uma constante, κ/r^2 , apesar de o próprio Kepler não ter encontrado essa expressão que justifica o formato elíptico das órbitas planetárias. Isso fará com que às vezes façamos referência ao potencial coulombiano, também a menos de uma constante, κ/r , de maneira indistinguível ao potencial gravitacional. O motivo disso é aproximar fenômenos que, apesar de serem distintos, respeitam as mesmas leis matemáticas gerais.

Por ora, deixaremos nossas ideias de teoria de grupos de Lie para fazer algo que, nesse trabalho, é obrigatório termos: a derivação do vetor Laplace-Runge-Lenz (LRL)[3].

Para uma força central de intensidade arbitrária $f(r)$ temos que a segunda lei de Newton pode ser escrita na forma:

$$\dot{\mathbf{p}} = f(r)\frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (2)$$

Agora, o produto vetorial entre a força e o

momentum angular \mathbf{L} será:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} &= \frac{mf(r)}{r} [\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}})] = \\ &= \frac{mf(r)}{r} [\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}}) - r^2 \dot{\mathbf{r}}],\end{aligned}\quad (3)$$

mas note que:

$$\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) = r\dot{r}.\quad (4)$$

Podemos agora calcular o produto vetorial $\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L}$ e o derivar no tempo para vermos o que acontece:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L}) &= \dot{\mathbf{p}} \times \dot{\mathbf{L}} + \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} + \mathbf{p} \times \dot{\mathbf{L}} \\ &= \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} + 0 \\ &= -mr^2 f(r) \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right),\end{aligned}\quad (5)$$

note que na segunda igualdade, utilizamos o fato de que, para um sistema que temos simetria esférica, vale a conservação do momento angular:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0.\quad (6)$$

Assim, para o problema da órbita de Kepler, isto é, $f(r) = -\kappa/r^2$, temos:

$$\frac{d}{dt}(\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L}) = \frac{d}{dt} \left(\frac{m\kappa\mathbf{r}}{r} \right).\quad (7)$$

Convém agora escrevermos:

$$\frac{d}{dt} \left(\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} - \frac{m\kappa\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{d}{dt} \mathbf{A} = 0,\quad (8)$$

e então mostramos que \mathbf{A} é um vetor que se conserva no tempo e é definido por

$$\mathbf{A} = \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} - \frac{m\kappa\mathbf{r}}{r}.\quad (9)$$

Esse vetor é o conhecido vetor de Laplace-Runge-Lenz. Uma curiosidade é que esse vetor não foi descoberto por Laplace, que foi somente o primeiro a derivá-lo de maneira algébrica. Quem o encontrou pela primeira vez, mas através da geometria, foi Jakob Hermann, que inclusive era parente distante de Euler. Diremos mais à frente porque Runge e Lenz também nomeiam o vetor.

Pode-se mostrar também que \mathbf{A} é paralelo ao versor $\hat{\mathbf{i}}$ canônico e com essa informação podemos também criar o vetor excentricidade \mathbf{e} , tal que

$$\mathbf{A} = \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} - m\kappa\hat{\mathbf{i}} = m\kappa \cdot \mathbf{e},\quad (10)$$

com $\mathbf{e} = e\hat{\mathbf{i}}$. Podemos então seguir com uma manipulação da equação 10 e realizar o produto escalar de ambos os lados dela por \mathbf{r} , da seguinte maneira:

$$(\mathbf{r}) \cdot \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} = m\kappa(\mathbf{e} + \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}),\quad (11)$$

$$L^2 = r(1 + e \cdot \cos\theta),\quad (12)$$

sendo que o lado esquerdo da última equação é encontrado com as propriedades de produto misto ($\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{L} = L^2$) e no lado direito dela, o ângulo θ é a mesma variável de ângulo polar usual; ela também nos possibilita escrever $r(\theta)$:

$$r(\theta) = \frac{L^2}{m\kappa(1 - e \cdot \cos\theta)},\quad (13)$$

a equação que descreve uma seção cônica, trajetória esperada do problema de Kepler.

2.2 Parênteses de Poisson

Como trabalharemos com análogos entre o problema clássico da órbita de um planeta e o problema quântico da órbita do elétron, é importante definirmos os Parênteses de Poisson[3] que forma um elegante paralelo com os comutadores da mecânica quântica.

Os Parênteses de Poisson ($\{\}$) de duas funções u e v em respeito às duas variáveis canônicas q e p é definido como:

$$\{u, v\}_{(p,q)} = \{u, v\} = \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i}. \quad (14)$$

As propriedades algébricas dos Parênteses de Poisson merecem destaque:

Antissimetria:

$$\{u, v\} = -\{v, u\}. \quad (15)$$

Bilinearidade:

$$\{au + bv, w\} = a\{u, w\} + b\{v, w\}, \quad (16)$$

$$\{uv, w\} = \{u, w\}v + u\{v, w\}, \quad (17)$$

onde a e b são constantes.

Identidade de Jacobi:

$$\{u, \{v, w\}\} + \{v, \{w, u\}\} + \{w, \{u, v\}\} = 0. \quad (18)$$

Respeitando essas condições, o Parênteses de Poisson satisfaz os critérios estabelecidos para as álgebras de Lie e daí sua importância e proximidade com o comutador da mecânica quântica, já que ambos podem ser usados para definir um produto entre elementos de uma álgebra

de Lie.

Alguns livros denotam essa relação como um tanto “forçada” pelos físicos para fazer a mecânica quântica ter sua formulação mais aceita pela comunidade científica e, ao fazerem isso, acabam eventualmente diminuindo o Parênteses de Poisson a um produto “arcaico” que só teve um propósito histórico.

Ademais, podemos calcular os Parênteses de Poisson do vetor Laplace-Runge-Lenz \mathbf{A} com o momento angular \mathbf{L} , e com suas próprias componentes, encontrando:

$$\{A_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} A_k; \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \{A_i, A_j\} &= -\left(p^2 - \frac{2m\kappa}{r}\right) L_k \\ &= -2mH\epsilon_{ijk} L_k, \end{aligned} \quad (20)$$

onde H é o hamiltoniano do potencial coulombiano:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{r}. \quad (21)$$

Como trata-se de um problema com força conservativa, podemos dizer que o valor $2mH$ é conservado e então definimos um outro vetor \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \frac{\mathbf{A}}{\sqrt{-2mE}}, \quad (22)$$

notando que energias negativas atendem ao nosso estudo pois designam órbitas fechadas (estados ligados). Calculando os Parênteses de Poisson de \mathbf{D} com \mathbf{L} , obtemos:

$$\{D_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} D_k; \quad (23)$$

$$\{D_i, D_j\} = \epsilon_{ijk} L_k; \quad (24)$$

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k. \quad (25)$$

\mathbf{D} e \mathbf{L} formam álgebra de Lie $so(4) = so(3) + so(3)$, geradora o grupo de rotações em quatro dimensões $SO(4)$ - um grupo de simetria no problema de Kepler.

Se consideramos o problema de Kepler em casos de energias positivas, obtemos constantes de estrutura iguais às do grupo de Lorentz. Não podemos, no entanto, entender que se trata de um problema relativístico pois, não é de se surpreender que o problema de Kepler tenha simetrias em dimensões maior que as três espaciais, na medida que o hamiltoniano do problema está em um espaço de fase 6-dimensional.

No entanto, para nossos futuros propósitos de resolução do átomo de hidrogênio, também vale destacar os seguintes Parênteses de Poisson:

$$\{L_i, H\} = 0, \quad (26)$$

$$\{D_i, H\} = 0, \quad (27)$$

o que significa dizer que L_i e D_i deixam invariante o hamiltoniano.

3 Átomo de Hidrogênio

3.1 Introdução

Agora podemos começar a explorar a física do átomo de Hidrogênio em seu contexto quântico. É claro que a partir de então usaremos a notação de Dirac e também vamos explicar os dois princípios mais importantes da física nessa representação[6]; além disso, a partir de agora, utilizaremos o negrito para fazermos referências aos operadores da mecânica quântica. O nosso objetivo é encontrar o resultado da energia quantizada do átomo de Hidrogênio

(equação 1), mas sem a utilização da equação de Schrödinger, mostrando que esse resultado sai naturalmente da análise da álgebra de Lie $so(4)$ [2][7], um dos grandes feitos de Wolfgang Pauli. Ele se baseou em um trabalho de Wilhelm Lenz que ainda tratava o vetor LRL num contexto da “velha” mecânica quântica fazendo, por sua vez, referência ao Carle Runge, autor de notas de aula sobre vetores - entre eles, o LRL.

Princípio da Relatividade

Dois observadores, S e S' , descrevem um estado $|\psi\rangle$ em seus próprios sistemas de coordenadas nas formas $\langle S|\psi\rangle$ e $\langle S'|\psi\rangle$. A relação matemática que transforma funções de um sistema de coordenadas ao outro é $\langle S'|S\rangle$. O conjunto de transformações entre coordenadas forma um grupo.

Se o observador S quer determinar o que S' enxerga sobre uma função, ele aplica $\langle S'|S\rangle$ em $\langle S|\psi\rangle$ (em como ele mesmo enxerga), isto é:

$$\langle S'|S\rangle \langle S|\psi\rangle = \langle S'|\psi\rangle. \quad (28)$$

Princípio da Equivalência

Foi ilustrado como dois observadores enxergam um mesmo sistema com o princípio da relatividade. Agora, se assumirmos que esse mesmo princípio funciona para qualquer sistema, ou seja, que o universo inteiro será observado da mesma maneira por S e S' , o observador S pode usar as funções matemáticas $\langle S'|\psi\rangle$ para descrever um *novo* estado físico $|\psi'\rangle$ que

deve existir:

$$\langle S|\psi'\rangle = \langle S'|\psi\rangle, \quad (29)$$

isto é, o que um observador está enxergando, outro observador também deverá enxergar, ou seja, a física deve ser a mesma e não entrar em contradição ao mudarmos de um observador ao outro; todo fenômeno observado por um pode vir a ser observado por outro.

Para que isso fique mais claro, tomemos por exemplo a transformação de um hamiltoniano H pela ação de um elemento de grupo do $SO(3)$ (uma rotação em 3 dimensões) $\langle S'|H|S'\rangle = \langle S'|S\rangle \langle S|H|S\rangle \langle S|S'\rangle$; a invariância do hamiltoniano seria representada por $\langle S|H|S\rangle = \langle S'|H|S'\rangle$ e, se o sistema tiver simetria esférica, a existência de um estado $2p_z$ implica em um outro observador poder enxergar um estado $2p_x$, $2p_y$ ou qualquer combinação linear de ambos, e, pelo princípio da equivalência, implica na existência deles.

3.2 Simetrias e degenerescência

Consideremos g_i como uma operação de um grupo G que deixa um hamiltoniano H invariante, ou seja:

$$g_i H = H g_i. \quad (30)$$

Se um hamiltoniano tiver simetrias geométricas, significa que ele tem a mesma forma em dois sistemas de coordenadas que diferem pela ação de g_i . Sob essas condições, se um estado $|\psi\rangle$ é autoestado de H com autovalor E , o estado $g_i|\psi\rangle$ também é autoestado de H :

$$\begin{aligned} H(g_i|\psi\rangle) &= (H g_i)|\psi\rangle = (g_i H)|\psi\rangle \\ &= g_i(H|\psi\rangle) = g_i(E|\psi\rangle) = E(g_i|\psi\rangle). \end{aligned} \quad (31)$$

Por ser um problema de simetria esférica, é de se esperar que a atuação de operadores de rotação no hamiltoniano do átomo de Hidrogênio,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad (32)$$

mantenham-o invariante. Os operadores de momentum angular L_x , L_y e L_z são os geradores de rotações infinitesimais nos eixos canônicos e as relações de comutação

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k, \quad (33)$$

$$[\mathbf{L}, H] = 0, \quad (34)$$

constituem a álgebra $so(3)$ que gera o grupo de rotações em três dimensões $SO(3)$. Como o operador L_i pode se relacionar de maneira mais direta com rotações pode ser encontrado no apêndice [A](#).

Os operadores de momentum angular possuem representações matriciais com uma base composta por vetores que denotamos $|l, m\rangle$, tais que:

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad (35)$$

$$\mathbf{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad (36)$$

com m inteiro, tal que $-l \leq m \leq l$ e l inteiro. A escolha de L_z dá-se pois nesse contexto é útil definirmos os operadores de levantamento L_+ e abaixamento L_- com $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$, e o operador L_z se relaciona com eles da seguinte

maneira:

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}, \quad (37)$$

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z, \quad (38)$$

além disso, em coordenadas esféricas (r, θ_1, ϕ) , o operador L_z adquire uma forma relativamente simples:

$$L_z = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (39)$$

Também temos que as restrições dos valores de $-l \leq m \leq l$ implicam que existem $2l + 1$ dimensões nesse espaço vetorial, então essa é uma representação de dimensão finita e irredutível do grupo $SO(3)$; o valor $2l + 1 \equiv N$ também é, então, o número de degenerescências necessárias para um hamiltoniano possuir invariância por rotações tridimensionais, como o caso de 32[2].

Entretanto, se lembrarmos que simetrias implicam em degenerescências e analisarmos o átomo de hidrogênio com número quântico principal fixo em $N = n + l + 1$, levando em conta que existem $\sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = N^2$ estados degenerados, vemos que existem mais estados degenerados do que o esperado somente com invariância por rotações tridimensionais do hamiltoniano. Somos levados então a esperar que existem mais simetrias no potencial coulombiano do que podemos observar “com os olhos”.

Essa ideia está correta? Sim, existem simetrias que são geradas por conta de forças específicas e recebem o nome de simetrias dinâmicas. O caso do potencial coulombiano é o que vamos estudar e no grupo de rotações em quatro dimensões $SO(4)$ encontramos suas simetrias dinâmicas.

Para explorarmos a simetria dinâmica, retomamos o vetor Laplace-Runge-Lenz, mas deixando agora em evidência uma massa reduzida $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ representando duas massas interagindo sob o potencial $1/r$:

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}}{\mu} - \frac{\kappa}{r} \hat{\mathbf{r}}, \quad (40)$$

com o acento circunflexo designando observáveis clássicas.

Entretanto, como poderíamos construir um vetor Laplace-Runge-Lenz “quântico”? A substituição imediata de análogos quânticos na equação 40 não nos daria um operador hermitiano. Então definimos um “novo” vetor Laplace-Runge-Lenz \mathbf{M} a partir de uma antissimetriação:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\kappa}{r} \mathbf{r}; \quad (41)$$

com as relações de comutação entre \mathbf{r} e \mathbf{p} [2], mostra-se que:

$$[\mathbf{M}, H] = 0; \quad (42)$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = 0; \quad (43)$$

$$\mathbf{M}^2 = \frac{2H}{\mu} (\mathbf{L}^2 + \hbar^2) + k^2. \quad (44)$$

A abordagem de Pauli para resolver o átomo de H irá se apoiar na ideia de encontrar o que as três componentes de \mathbf{M} geram, da mesma maneira que \mathbf{L} é responsável por gerar rotações. Começamos então a “traduzir” para quântica alguns Parênteses de Poisson mostrados na seção 2.2:

$$[M_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} M_k, \quad (45)$$

$$[M_i, M_j] = -\frac{2i\hbar}{\mu} H L_k. \quad (46)$$

Diferentemente de $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ que forma álgebra de Lie $so(3)$, os dois comutadores 45 e 46 não fazem o mesmo pois, apesar do primeiro envolver somente \mathbf{M} e \mathbf{L} , o segundo também envolve o hamiltoniano H . No entanto, por tratar-se de um potencial coulombiano que, por definição, não depende explicitamente do tempo, podemos trabalhar em um subespaço do espaço de Hilbert que possui um valor específico de energia E negativo, pois estamos interessados em estados ligados. Desse modo, temos:

$$[M_i, M_j] = -\frac{2i\hbar}{\mu} E L_k, \quad (47)$$

e isso nos motiva a definirmos um outro operador \mathbf{M}' , com o fim de facilitar cálculos:

$$\mathbf{M}' = \left(-\frac{\mu}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{M}, \quad (48)$$

e agora obtemos as relações de comutação:

$$[M'_i, M'_j] = i\hbar L_k. \quad (49)$$

Vamos utilizar uma notação um pouco diferente para os vetores de posição $\mathbf{x} = (x, y, z)$ e momentum $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ para simplesmente $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ e $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ de modo que faça sentido escrevermos:

$$\mathbf{L} = (L_{23}, L_{31}, L_{12}), \quad (50)$$

considerando

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i; \quad (51)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}; \quad (52)$$

com os índices $i, j = 1, 2, 3$. Inventamos agora uma quarta componente da posição x_4 e do momentum p_4 tais que:

$$M'_x = L_{14}, \quad M'_y = L_{24}, \quad M'_z = L_{34}, \quad (53)$$

assim, os seis geradores de 50 e 53, são uma generalização de \mathbf{L} de três para quatro dimensões. O grupo que eles geram é o grupo de rotações em quatro dimensões $SO(4)$. Claramente, x_4 e p_4 não correspondem a variáveis dinâmicas mas eles vêm da ideia de que uma força específica possibilita essa generalização e por isso, dizemos que estamos tratando de uma simetria dinâmica do átomo de Hidrogênio. Vale destacarmos que as quartas componentes da posição e do momentum não são as mesmas do usual tratamento da relatividade e que aqui temos um problema inteiramente não relativístico.

O grupo $SO(4)$ é de posto dois e contém como um de seus subgrupos o $SO(3)$ de posto um. A estrutura do nosso grupo pode ser representada da seguinte maneira:

$$SO(4) \rightarrow SO(3) \times SO(3), \quad (54)$$

a decomposição de $SO(4)$ com seis dimensões, em dois outros grupos de posto um, cada qual com três dimensões.

Para encontrarmos as energias dadas em 1, precisamos redefinir duas grandezas que são bases dos dois subgrupos destacados de $SO(4)$:

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}'), \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M}'), \quad (55)$$

e com esses operadores temos as seguintes re-

lações de comutação:

$$[\mathbf{I}, \mathbf{K}] = 0; \quad (56)$$

$$[I_i, I_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}I_k; \quad (57)$$

$$[K_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}K_k; \quad (58)$$

$$[\mathbf{I}, H] = [\mathbf{K}, H] = 0; \quad (59)$$

o que mostra de maneira direta - pois são análogos aos operadores L_i - os possíveis autovalores de \mathbf{I}^2 e \mathbf{K}^2 :

$$\mathbf{I}^2 = \iota(\iota + 1)\hbar^2 \cdot \mathbb{1}, \quad (60)$$

$$\mathbf{K}^2 = k(k + 1)\hbar^2 \cdot \mathbb{1}, \quad (61)$$

com ι e k podendo ser semi-inteiros ou inteiros. Essas relações também evidenciam como o grupo é de posto dois, visto que \mathbf{I} e \mathbf{K} podem ser interpretados como geradores de rotações em planos ortogonais.

O fato do grupo $SO(4)$ ser de posto dois, implica que podemos destacar dois operadores de Casimir independentes do $SO(4)$. São eles:

$$\mathbf{I}^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{L} + \mathbf{M}')^2, \quad (62)$$

$$\mathbf{K}^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{L} - \mathbf{M}')^2. \quad (63)$$

Novamente a comparação desses operadores com o operador \mathbf{L}^2 ajuda a compreender as passagens. Outra alternativa seria definir a soma e a subtração de \mathbf{I}^2 e \mathbf{K}^2 e utilizando a equação 43, obtemos:

$$\mathbf{C} = \mathbf{I}^2 + \mathbf{K}^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{M}'^2), \quad (64)$$

$$\mathbf{C}' = \mathbf{I}^2 - \mathbf{K}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}' = 0. \quad (65)$$

A equação 65 nos revela que necessariamente $\mathbf{I}^2 = \mathbf{K}^2$, o que significa também dizer que seus

autovalores são iguais, $k = \iota$. Disso tiramos:

$$\mathbf{C} = 2\iota(\iota + 1)\hbar^2 \cdot \mathbb{1}, \quad (66)$$

e se, por outro lado, substituimos \mathbf{M}' na definição de \mathbf{C} , encontraremos:

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{M}'^2) = -\frac{\hbar^2}{2} - \frac{\mu\kappa^2}{4E}. \quad (67)$$

Das equações 66 e 67, encontramos:

$$E_\iota = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2\iota + 1)^2}, \quad (68)$$

como ι pode ser inteiro ou semi inteiro, $2\iota + 1$ é igual a n , tal que, $n = 1, 2, 3, \dots$, assim:

$$E_n = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2}; \quad (69)$$

encontramos um dos grandes resultados da mecânica quântica. A degenerescência de N^2 do átomo de Hidrogênio também é explicada visto que cada operador I_z e K_z possui $2\iota + 1 = N$ autovalores independentes e então temos $N \cdot N$ estados degenerados. Mostramos, assim, uma aplicação da teoria de grupos de Lie e suas álgebras associadas para resolvermos um problema de física.

3.3 Dinâmica em 4-D

Vimos como os operadores \mathbf{L} e \mathbf{M} são geradores infinitesimais do $SO(4)$. Se utilizarmos o produto vetorial deles, temos $\mathbf{W} = \mathbf{L} \times \mathbf{M}$, construímos uma base em \mathbb{R}^3 com

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \\ \mathbf{M} &= \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L}}{\mu} - \kappa \frac{\mathbf{r}}{r}, \\ \mathbf{W} &= \frac{\mathbf{p}}{\mu} L^2 - \kappa \frac{\mathbf{L} \times \mathbf{r}}{r}.\end{aligned}$$

A partícula se move em um plano perpendicular a \mathbf{L} visto que $\mathbf{L} \cdot \mathbf{r} = 0$. O vetor \mathbf{p} está neste mesmo plano. Vamos tomar um sistema de coordenadas em que o eixo z canônico está na direção de \mathbf{L} e os eixos canônicos x e y nas direções de \mathbf{M} e \mathbf{W} , respectivamente. Nesse sistema de coordenadas, temos:

$$p_x = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{M}}{\sqrt{\mathbf{M} \cdot \mathbf{M}}}, \quad (70)$$

$$p_y = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{W}}{\sqrt{\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}}}, \quad (71)$$

$$p_z = 0. \quad (72)$$

Observe que as duas componentes p_x e p_y obedecem a relação:

$$p_x^2 + \left(p_y - \frac{\mu M}{L}\right)^2 = \left(\frac{\mu \kappa}{L}\right)^2, \quad (73)$$

o que significa que enquanto a partícula se move em uma elipse, as suas componentes do momentum estão em uma circunferência com centro deslocado em y de $\mu M/L$ e raio $\mu \kappa/L$. Agora vamos tomar que esse círculo em \mathbb{R}^3 , com projeções estereográficas, passa a ser um círculo em uma hipersfera $S^3 \subset \mathbb{R}^4$. Podemos

estender as coordenadas de \mathbb{R}^3 para \mathbb{R}^4 da seguinte maneira[6][1]:

$$(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \rightarrow (w, x, y, z) \in \mathbb{R}^4 \quad (74)$$

$$(p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{R}^3 \rightarrow (p_w, p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{R}^4 \quad (75)$$

e utilizando as coordenadas esféricas em quatro dimensões, escrevemos um vetor unitário $\hat{\mathbf{u}} = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ no espaço dos momenta e temos que suas coordenadas são:

$$u_1 = \frac{2p_0 p_x}{p_0^2 + p^2} = \text{sen}\theta_2 \cdot \text{sen}\theta_1 \cdot \text{cos}\phi, \quad (76)$$

$$u_2 = \frac{2p_0 p_y}{p_0^2 + p^2} = \text{sen}\theta_2 \cdot \text{sen}\theta_1 \cdot \text{sen}\phi, \quad (77)$$

$$u_3 = \frac{2p_0 p_z}{p_0^2 + p^2} = \text{sen}\theta_2 \cdot \text{cos}\theta_1, \quad (78)$$

$$u_4 = \frac{p^2 - p_0^2}{p_0^2 + p^2} = \text{cos}\theta_2, \quad (79)$$

com $p_0 = \sqrt{-2mE}$ e as coordenadas θ_1 e ϕ as coordenadas esféricas usuais ao passo que θ_2 faz parte das coordenadas esféricas em quatro dimensões (note que para $\theta_2 = \pi/2$ voltamos às coordenadas esféricas tridimensionais) e com elas podemos construir o vetor unitário $\hat{\mathbf{u}}$

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{p^2 - p_0^2}{p_0^2 + p^2} \hat{\mathbf{w}} + \frac{2p_0}{p^2 + p_0^2} \mathbf{p}, \quad (80)$$

podendo-se notar que $\hat{\mathbf{w}}$ é ortogonal a qualquer vetor em \mathbb{R}^3 .

O círculo 73 é a projeção estereográfica de um círculo em S^3 no espaço físico \mathbb{R}^3 (você pode ler mais sobre essa projeção no apêndice B). Então, o que fazem as rotações causadas pelo $SO(4)$? Elas rotacionam a hipersfera S^3 em torno de si, rotacionando círculos que são projetados como trajetórias circulares do momentum em \mathbb{R}^3 .

3.4 A Equação de Schrödinger

Agora vamos mostrar que a solução da equação de Schrödinger para esse problema realmente reside no $SO(4)$ [1]. Para tanto, partimos da equação de Schrödinger do átomo de Hidrogênio:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}\psi(\mathbf{x}) - \frac{\kappa}{r}\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}), \quad (81)$$

utilizando a transformada de Fourier,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \Phi(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}d^3\mathbf{r}, \quad (82)$$

queremos escrever 81 no espaço dos momenta, pois é nele que a análise feita na última secção faz sentido. Essa transformação nos levará a uma equação integral cujo estudo trás também as energias quantizadas do átomo de Hidrogênio (1)

Se multiplicarmos a equação 81 por $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar)$ e realizarmos uma integração no espaço, temos no lado esquerdo da equação:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}\psi(\mathbf{x}) - \frac{\kappa}{r}\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{r} \right] \psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (83)$$

Vamos detalhar a mudança de coordenadas, começando pelo o termo multiplicando $\mathbf{p}^2/2m$ e utilizando 82:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \int \frac{p'^2}{2m}e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}\Phi(\mathbf{p}')d^3\mathbf{p}'d^3\mathbf{r}; \end{aligned} \quad (84)$$

como os integrandos podem comutar, escrevemos:

$$\begin{aligned} \int \frac{p'^2}{2m}\Phi(\mathbf{p}') \int (2\pi\hbar)^{-3}e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar}d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}' \\ = \int \frac{p'^2}{2m}\Phi(\mathbf{p}')\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')d^3\mathbf{p}' \\ = \frac{p^2}{2m}\Phi(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (85)$$

Agora partimos para o termo que multiplica o potencial $-\kappa/r$ e realizamos a mesma substituição de 82:

$$\begin{aligned} \frac{-\kappa}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \\ = \frac{-\kappa}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \frac{e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}\Phi(\mathbf{p}')d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}', \end{aligned} \quad (86)$$

com o fato de que

$$\int \frac{e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}d^3\mathbf{r} = \frac{4\pi\hbar^2}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2}, \quad (87)$$

o termo se reduz a:

$$\begin{aligned} \frac{-\kappa}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \frac{e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}\Phi(\mathbf{p}')d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}' \\ = -\frac{\kappa}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\Phi(\mathbf{p}')}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2}d^3\mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (88)$$

Voltando ao lado direito da equação 81, também multiplicado por $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\cdot\exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar)$ e integrando no espaço, como E é constante, temos somente uma transformada de Fourier:

$$\frac{E}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = E\Phi(\mathbf{p}), \quad (89)$$

conseguimos, enfim, escrever a seguinte equa-

ção integral:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}\Phi(\mathbf{p}) - \frac{\kappa}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\Phi(\mathbf{p}')d^3\mathbf{p}'}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = E\Phi(\mathbf{p}). \quad (90)$$

O vetor \mathbf{p} , através de projeções estereográficas, pode ser escrito em função de $\hat{\mathbf{u}}$, definido em 80, da seguinte maneira:

$$\mathbf{p} = p_0 \frac{(u_1, u_2, u_3)}{1 - u_4}, \quad (91)$$

e dessa relação podemos calcular que o módulo de $\mathbf{p} = p = p_0 \cdot \cot(\theta_2/2)$ utilizando 76 e as três relações que a seguem, e então o elemento de volume $d^3\mathbf{p}$ fica:

$$d^3\mathbf{p} = \frac{p_0^3 \cdot d\Omega}{(1 - u_4)^3}, \quad (92)$$

notando que $d\Omega$ é o elemento de superfície de uma hiperesfera:

$$d\Omega = \text{sen}^2\theta_2 \cdot d\theta_2 \cdot \text{sen}\theta_1 \cdot d\theta_1 \cdot d\phi. \quad (93)$$

Com isso podemos utilizar no lugar de $\Phi(\mathbf{p})$, uma função $\Psi(\theta_2, \theta_1, \phi)$ em coordenadas esféricas de uma hiperesfera com a relação:

$$\Psi(\theta_2, \theta_1, \phi) = \frac{\pi}{\sqrt{8}} p_0^{-\frac{5}{2}} (p_0^2 + p^2)^2 \Phi(\mathbf{p}). \quad (94)$$

As condições de normalização são respeitadas devido à escolha dos fatores multiplicativos, tomando que a área superficial de uma esfera de raio unitário em quatro dimensões é $2\pi^2$. Com essa nova notação, a equação 90 assume a forma:

$$\Psi(\theta_2, \theta_1, \phi) = \frac{\mu\kappa^2}{2\pi^2\hbar\sqrt{-2\mu E}} \int \frac{\Psi(\theta'_2, \theta'_1, \phi')}{4\text{sen}^2\frac{\omega}{2}} d\Omega', \quad (95)$$

com $2\text{sen}(\omega/2)$ o tamanho de uma corda e ω o tamanho de um arco que conecta dois pontos $(\theta_2, \theta_1, \phi)$ e $(\theta'_2, \theta'_1, \phi)$ [1] de uma hiperesfera de tal modo que

$$4\text{sen}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) = (\theta_2 - \theta'_2)^2 + (\theta_1 - \theta'_1)^2 + (\phi - \phi')^2. \quad (96)$$

No entanto, qual o significado da equação 95? Ela é a equação integral dos harmônicos esféricos em quatro dimensões, que também pode ser escrita da seguinte maneira[9]:

$$\Psi_n(\theta_2, \theta_1, \phi) = \frac{n}{2\pi^2} \int \frac{\Psi_n(\theta'_2, \theta'_1, \phi)}{1 - 2r\cos\omega + r^2} d\Omega', \quad (97)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$

Partindo do termo $1/(1 - 2r\cos\omega + r^2)$ que é o inverso do quadrado da distância entre dois pontos no \mathbb{R}^4 , fazemos a seguinte expansão:

$$\frac{1}{1 - 2r\cos\omega + r^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)P_{n,4}(\cos\omega)r^n, \quad (98)$$

sendo $P_{n,4}$ os Polinômios de Legendre de ordem n em \mathbb{R}^4 . As funções Υ_{nlm} definidas

$$\Upsilon_{nlm}(\theta_2, \theta_1, \phi) = N_{nl}P_{n,4}^l(\cos\theta_2)Y_{lm}(\theta_1, \phi), \quad (99)$$

são os harmônicos esféricos 4-dimensionais, onde N_{nl} são constantes de normalização e com $Y_{lm}(\theta_1, \phi)$ sendo os harmônicos esféricos usuais e as funções $P_{n,4}^l(x)$ definidas por:

$$P_{n,4}^l(x) = (1 - x^2)^{1/2} \frac{d^l}{dx^l} P_{n,4}(x), \quad (100)$$

para $l = 0, 1, 2, \dots, n$. Uma observação é que as funções de 100 são encontrada quando resolve-

mos a equação de Laplace em quatro dimensões[5][9].

Como esses harmônicos esféricos definem de maneira completa as funções dentro de uma esfera em quatro dimensões, temos que 95 é uma combinação linear dos harmônicos esféricos:

$$\Psi(\theta_2, \theta_1, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n \sum_{m=-l}^l a_{nlm} \Upsilon_{nlm}(\theta_2, \theta_1, \phi). \quad (101)$$

Utilizando que Υ_{nlm} obedece a relação[5][9]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\text{sen}\frac{\omega}{2})^2} &= \frac{1}{|n - n'|} = 2\pi^2 \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n \sum_{m=-l}^l \Upsilon_{nlm}^*(\theta'_2, \theta'_1, \phi') \Upsilon_{nlm}(\theta_2, \theta_1, \phi). \end{aligned} \quad (102)$$

A primeira igualdade é justificada quando lembramos que $2\text{sen}\frac{\omega}{2}$ é a distância entre dois pontos n e n' . Enfim utilizando 95, 101, 102 e a ortogonalidade dos harmônicos esféricos, encontramos

$$0 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n \sum_{m=-l}^l \left(1 - \frac{\mu\kappa}{\hbar\sqrt{2\mu E}(n+1)} \right) \times a_{nlm} \Upsilon_{nlm}(\theta_2, \theta_1, \phi), \quad (103)$$

para que isso seja válido para todos os harmônicos esféricos é necessário que

$$1 - \frac{\mu\kappa}{\hbar\sqrt{2\mu E}(n+1)} = 0. \quad (104)$$

Dessa relação temos que:

$$E = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(n+1)^2}, \quad (105)$$

novamente a equação 1.

4 Conclusão

Com a definição do Parênteses de Poisson, aproximamos a mecânica clássica da teoria de grupos de Lie e às álgebras de Lie. Isso nos possibilita usar as estruturas dessas álgebras, que por sua vez, mostram o papel do momento angular e do vetor Laplace-Runge-Lenz como geradores de rotações em três e quatro dimensões, respectivamente. Com essas ideias, estabelecemos uma base para construirmos uma analogia do problema de Kepler com o átomo de Hidrogênio e dos observáveis com seus respectivos derivados quânticos que culminam no resultado da energia quantizada do átomo de Hidrogênio não relativístico.

Além disso, esse resultado nos convida à análise da dinâmica do problema do átomo de Hidrogênio em quatro dimensões e a revisitarmos a equação de Schrödinger desse átomo para vermos que a sua solução realmente se encontra em \mathbb{R}^4 com a utilização de projeções estereográficas e dos harmônicos esféricos em quatro dimensões.

Apêndices

A Operador L como gerador de rotações

Podemos imaginar um operador R pertencente ao $SO(3)$ e atua rotacionando um vetor \mathbf{r} , o que leva um ket $|\alpha\rangle$ com função de onda $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ para outro ket $|\alpha'\rangle$ com função de onda $\psi_{\alpha'}(\mathbf{x})$, isto é,

$$\psi_{\alpha'}(R\mathbf{x}) = \psi_\alpha(\mathbf{x}). \quad (106)$$

Considerando um operador $U_R(\boldsymbol{\phi})\psi$ que gera rotações representadas por $\boldsymbol{\phi}$ (com a direção do vetor sendo a mesma do eixo de rotação e o módulo dele ϕ o quanto for rotacionado),

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\alpha(\mathbf{x}) = \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}). \quad (107)$$

De 106 e 107, para rotações de ângulos pequenos:

$$\begin{aligned} U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\alpha(\mathbf{x}) &= \psi_\alpha(R^{-1}\mathbf{x}) \\ &\approx \psi_\alpha(\mathbf{x} - \boldsymbol{\phi} \times \mathbf{x}) \\ &\approx \psi_\alpha(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla \psi_\alpha(\mathbf{x}) \\ &\approx \psi_\alpha(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{x}) \cdot \mathbf{p} \cdot \psi_\alpha(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (108)$$

Na última passagem utilizamos a definição de momentum linear da mecânica quântica, e então o operador $U_R(\boldsymbol{\phi})$, com ajuda de propriedades de produto misto e usando a definição $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ pode ser escrito como:

$$U_R(\boldsymbol{\phi}) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{L}. \quad (109)$$

Se incrementamos uma outra rotação de um ângulo $\Delta\phi$, a operação de rodar $\phi + \Delta\phi$ sobre o eixo x , por exemplo, é representada por:

$$U_R(\phi + \Delta\phi) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta\phi L_x\right) U_R(\phi). \quad (110)$$

Então o operador $U_R(\phi)$ deverá satisfazer a equação diferencial:

$$\frac{dU_R(\phi)}{d\phi} = -\frac{i}{\hbar} L_x U_R(\phi), \quad (111)$$

com a condição de contorno imediata $U_R(0) = 1$ (se rodamos em 0 radianos, temos a identi-

dade atuando) temos:

$$U_R(\phi) = e^{-i\phi L_x/\hbar}. \quad (112)$$

Se não impomos a restrição de rotação em torno de um eixo específico:

$$U_R(\boldsymbol{\phi}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{L}\right), \quad (113)$$

obtemos o operador que gera rotações finitas e evidencia o papel do momentum angular como “gerador” de rotações.

B Projeções Estereográficas

Vamos realizar uma projeção estereográfica de um ponto contido em uma esfera S^2 de raio p_0 e um plano π , cujas equações são:

$$S^2 : x^2 + y^2 + z^2 = p_0^2; \quad (114)$$

$$\pi : z = 0. \quad (115)$$

Considerando os pontos $N = (0, 0, p_0)$ e $P' = (p'_x, p'_y, p'_z)$, com $P' \in S^2$ e $p'_z > 0$, podemos construir uma reta NP' com equação vetorial

$$NP' : (x', y', z') = N + \lambda(P' - N), \quad (116)$$

com (x', y', z') um ponto arbitrário da reta e λ um parâmetro real.

Se quisermos ver a projeção estereográfica \mathcal{T} de P' , precisamos estender a reta até o plano π , de modo que ela passe pelo ponto $P \in \pi$, tal que $P = (p_x, p_y, 0)$. Temos então:

$$\begin{aligned} (p_x, p_y, 0) &= N + \lambda(P' - N) \\ &= [\lambda p'_x, \lambda p'_y, \lambda(p'_z - p_0) + p_0], \end{aligned} \quad (117)$$

pela última componente desse ponto,

$$\lambda = \frac{p_0}{p_0 - p'_z}. \quad (118)$$

Então o nosso ponto P' pode ser projetado no plano π , no ponto P , com \mathcal{T} da seguinte maneira:

$$(p'_x, p'_y, p'_z) \xrightarrow{\mathcal{T}} \left(\frac{p_0}{p_0 - p'_z} p'_x, \frac{p_0}{p_0 - p'_z} p'_y \right). \quad (119)$$

Assim, dado um ponto em uma esfera, com \mathcal{T} temos sua projeção de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$. Se simplesmente ampliamos o número de dimensões da projeção de $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^3$ e as coordenadas de \mathbf{p} , obtemos:

$$(p_x, p_y, p_z, p_w) \xrightarrow{\mathcal{T}} \frac{p_0}{p_0 - p_w} (p_x, p_y, p_z), \quad (120)$$

evidenciando p_0 :

$$\frac{p_0^2}{p_0 \left(1 - \frac{p_0}{p_w}\right)} \left(\frac{p_x}{p_0}, \frac{p_y}{p_0}, \frac{p_z}{p_0} \right) = \frac{p_0}{1 - u_4} (u_1, u_2, u_3), \quad (121)$$

o que explica a equação 91, visto que partimos de um sistema de coordenadas que utiliza as componentes de \mathbf{p} divididas por p_0 como coordenadas retangulares.

Podemos também estudar a projeção inversa \mathcal{T}^{-1} , para de um ponto em um plano, obtermos um ponto na esfera S^2 . As contas são parecidas, consideramos a mesma reta NP' mas com o vetor de direção \vec{PN} , ou seja:

$$PN : (x', y', z') = N + \mu(N - P), \quad (122)$$

com μ um parâmetro real.

Queremos a projeção de P na esfera em um

ponto P' , assim:

$$(p'_x, p'_y, p'_z) = (-\mu p_x, -\mu p_y, p_0 + \mu p_0), \quad (123)$$

da equação da esfera $x^2 + y^2 + z^2 = p_0^2$, encontramos:

$$\mu = \frac{-2p_0^2}{p_x^2 + p_y^2 + p_0^2}, \quad (124)$$

então:

$$p'_x = \frac{2p_0^2 p_x}{p_x^2 + p_y^2 + p_0^2}; \quad (125)$$

$$p'_y = \frac{2p_0^2 p_y}{p_x^2 + p_y^2 + p_0^2}; \quad (126)$$

$$p'_z = \frac{p_x^2 + p_y^2 - p_0^2}{p_x^2 + p_y^2 + p_0^2} \cdot p_0. \quad (127)$$

Para que isso tenha uma relação direta com nosso trabalho, podemos, novamente, ampliar a dimensão de uma projeção \mathcal{T}^{-1} de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^4$ e lembrar que \hat{u} é unitário e então:

$$\hat{u} = \frac{(p'_w, p'_x, p'_y, p'_z)}{p_0}, \quad (128)$$

o que confere a equação 76 e as outras três que a seguem.

C Cálculo de Parênteses de Poisson

Esse apêndice tem como objetivo delimitar os primeiros passos para calcularmos os Parênteses de Poisson expostos no texto principal, visto que não estamos acostumados a fazermos esse tipo de conta. Além disso, exploraremos um pequeno algoritmo em *Mathematica* que faz essa conta de maneira mais direta, sem que o leitor precise ser um ávido conhecedor dessa linguagem.

C.1 Cálculos Sem Computação Algébrica

Para facilitarmos os cálculos, convém escrevermos as componentes de \mathbf{A} da seguinte forma[3]:

$$A_i = p^2 q_i - q_j p_j p_i - m\kappa \frac{q_i}{\sqrt{q^2}}, \quad (129)$$

o que possível pois:

$$(\mathbf{p} \times \mathbf{x})_i = x_i p^2 - p_i (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}). \quad (130)$$

Então calculamos:

$$\frac{\partial A_i}{\partial q_j} = \left(p^2 - \frac{m\kappa}{\sqrt{q^2}} \right) \delta_{ij} - p_i p_j + m\kappa \frac{q_i q_j}{(q^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (131)$$

$$\frac{\partial A_i}{\partial p_j} = 2p_j q_i - q_j p_i - q_j p_j \delta_{ij}. \quad (132)$$

Com as equações 131 e 132, já podemos calcular $\{A_i, A_j\}$, mas lembrando que por conveniência, como os subíndices i e j já estão sendo utilizados, a derivada parcial deve ser escrita com um outro subíndice k como em $\partial/\partial q_k$, por exemplo,

$$\{A_i, A_j\} = 2m \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{q} \right) (p_i q_j - q_i p_j). \quad (133)$$

Devemos utilizar que $\mathbf{L} = \mathbf{p} \times \mathbf{q}$ e então $\epsilon_{ijk} L_k = p_i q_j - q_i p_j$ e que $H = p^2/2m - \kappa/q$ para o potencial do problema da órbita, assim:

$$\{A_i, A_j\} = -2mH \epsilon_{ijk} L_k. \quad (134)$$

Podemos também ver que:

$$\frac{\partial}{\partial q_l} (p_i q_j - q_i p_j) = \delta_{il} p_j - \delta_{jl} p_i, \quad (135)$$

$$\frac{\partial}{\partial p_l} (p_i q_j - q_i p_j) = \delta_{jl} q_i - \delta_{il} q_j, \quad (136)$$

onde optamos pelo subíndice l , visto que k já está sendo utilizado e, a ordem natural após esse novo subíndice será m .

Partindo agora de

$$\{p_i q_j - q_i p_j, A_k\} = \delta_{ik} A_j - \delta_{jk} A_i, \quad (137)$$

se o leitor fizer os cálculos, verá que as componentes A_i aparecem nas contas como definidas no início da seção. Se multiplicamos $p_i q_j - q_i p_j$ por uma constante igual a $\epsilon_{ijm}/2$, é claro que o Parênteses de Poisson será multiplicado pela mesma constante. Temos então:

$$\begin{aligned} \{\epsilon_{ijm}/2(p_i q_j - q_i p_j), A_k\} &= \frac{\epsilon_{ijm}}{2} (\delta_{ik} A_j - \delta_{jk} A_i) \\ &= \frac{\epsilon_{kjm}}{2} A_j - \frac{\epsilon_{ikm}}{2} A_i \\ &= \epsilon_{mki} A_k, \end{aligned} \quad (138)$$

ou seja:

$$\{L_i, A_j\} = \epsilon_{ijk} A_k. \quad (139)$$

Para calcularmos um último Parênteses de Poisson $\{H, A\}$, podemos utilizar as coordenadas cartesianas, o que nos dá:

$$\frac{\partial A_i}{\partial x_k} = p^2 \delta_{ik} - p_i p_k - m\kappa \left(\frac{\delta_{ik}}{r} - \frac{x_i x_k}{r^3} \right), \quad (140)$$

$$\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{\kappa x_i}{r^3}, \quad (141)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}, \quad (142)$$

e então o resultado sai mais rapidamente:

$$\begin{aligned} \{H, A_i\} &= \frac{\kappa x_k}{r^3} [2p_k x_i - x_k p_i - \delta_{ik} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})] \\ &\quad - \frac{p_k}{m} \left[p^2 \delta_{ik} - p_i p_k - m\kappa \left(\frac{\delta_{ik}}{r} - \frac{x_i x_k}{r^3} \right) \right] \\ &= 0. \end{aligned} \tag{143}$$

Se utilizamos nossa definição de \mathbf{D} , os resultados não alteram ao menos das constantes multiplicativas. Temos então, os Parênteses de

Poisson sobre os quais falamos no texto:

$$\{D_i, D_j\} = \epsilon_{ijk} L_k, \tag{144}$$

$$\{D_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} D_k, \tag{145}$$

$$\{D_i, H\} = 0. \tag{146}$$

Essas contas evidenciam que, mesmo em um contexto clássico, se tomamos os Parênteses de Poisson como produto de Lie, as observáveis \mathbf{D} e \mathbf{L} já se mostram como a álgebra de $so(4)$ geradora do grupo $SO(4)$.

C.2 Cálculos Com *Mathematica*

Segue um pequeno código que o leitor pode utilizar para calcular com mais facilidade e agilidade os Parênteses de Poisson, e como o algoritmo nos apresentou os resultados que outrora calculamos.

A começar, definimos as grandezas com as quais trabalharemos:

```
In[1]:= p = {p1,p2,p3}
        q = {q1,q2,q3}
        L = q x p
        A = p x L - m*k*q/(sqrt(q.q))
        H = p.p/(2*m) - k/(sqrt(q.q))
```

Agora podemos definir como se calcula os Parênteses de Poisson com a função *ParPoisson* e pedimos para que alguns cálculos sejam feitos:

```
In[2]:= ParPoisson[a_, b_, q_List, p_List] := Block[{pk, n}, n = Length[q];
        If[n == Length[p],
            pk = Simplify[
                Sum[D[a, q[[j]]] D[b, p[[j]]] - D[b, q[[j]]] D[a, p[[j]]], {j, 1,
                    n}]], Print["Tamanho Incompativel"]]

In[3]:= ParPoisson[L[[1]],L[[2]],q,p]

Out[3]= p2q1 - p1q2

In[4]:= Simplify[ParPoisson[A[[1]], A[[2]], q, p]]
```

$$\text{Out[4]} = \frac{(p_2q_1 - p_1q_2)(-2km + (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)\sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2})}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}}$$

In[5]:= `Simplify[ParPoisson[A[[1]], L[[2]], q, p]]`

$$\text{Out[5]} = p_1p_3q_1 + p_2p_3q_2 - p_1^2q_3 - p_2^2q_3 + \frac{kmq_3}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}}$$

In[6]:= `Simplify[ParPoisson[H, A[[1]], q, p]]`

Out[6]= 0

O leitor pode usar o mesmo código para calcular outros Parênteses de Poisson, sempre tendo cuidado para definir os vetores de coordenadas e momenta que optar por utilizar. Para um código mais otimizado, recomenda-se uma checada nas referências [4].

Referências

- [1] V. A Fock. “Hydrogen Atom and Non-Euclidean Geometry”. Em: *V. A. Fock - Selected works: quantum mechanics and quantum field theory*. Chapman & Hall/CRC, 1935.
- [2] Leonard I. Schiff. *Quantum Mechanics, 3rd Edition*. McGraw-Hill, Inc., 1968.
- [3] H. Goldstein. *Classical Mechanics, 2nd Edition*. Addison Wesley, 1980.
- [4] G. Baumann. *Mathematica for Theoretical Physics Classical Mechanics and Nonlinear Dynamics, 2nd Edition*. Springer, 2004.
- [5] G. F. Torres del Castillo. “The hydrogen atom via the four-dimensional spherical harmonics”. Em: *Revista Mexicana de Física* 53 (Outubro de 2007).
- [6] Robert Gilmore. *Lie Groups, Physics and Geometry an Introduction for Physicists, Engineers and Chemists*. Cambridge University Press, 2008.
- [7] Lulu Liu. “Dynamical Symmetry of the Hydrogen Atom”. Em: *MIT Educational Paper* (Abril de 2008).
- [8] Nadir Jeevanjee. *An Introduction to Tensors and Group Theory for Physicists, 2nd Edition*. Birkhäuser, 2010.
- [9] Christopher R. Frye & Costas Efthimiou. *Spherical Harmonics in p Dimensions*. URL: <https://arxiv.org/pdf/1205.3548.pdf>.