Amanda Ziviani de Oliveira

Simetria Dinâmica na Mecânica Quântica

Vitória – ES, Brasil

2014

Amanda Ziviani de Oliveira

Simetria Dinâmica na Mecânica Quântica

Monografia apresentada ao curso de Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito essencial para obtenção do Grau de Bacharela em Física.

Universidade Federal do Espírito Santo

Departamento de Física

Orientador: Prof. Dr. Galen Mihaylov Sotkov

Vitória – ES, Brasil

2014

Amanda Ziviani de Oliveira

Simetria Dinâmica na Mecânica Quântica

Monografia apresentada ao curso de Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito essencial para obtenção do Grau de Bacharela em Física.

Aprovada em: 14 de Março de 2014.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Galen Mihaylov Sotkov
Orientador (DFIS/UFES)

Prof. Dr. José André Lourenço
Convidado (DCN/UFES)

Prof. Dr. Ulysses Camara da Silva
Convidado (DFIS/UFES)

Vitória – ES, Brasil

Agradecimentos

Agradeço à você, leitor, pelo interesse em teoria de grupos e simetria dinâmica.

Aos companheiros de graduação: Denilson, Ewerton, Rheymisson, Uzias, Ivan, Geovanna, Jaime e Victor.

Ao Andre e ao Galen pela orientação e também por conseguirem me suportar ao longo dos últimos semestres.

Ao Professor Ricardo Berrêdo pelas epifanias ao aprender física.

Por fim, agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para eu me tornar uma aluna e uma pessoa melhor.

*"Mire veja: o mais importante e bonito, do mundo, é isto:
que as pessoas não estão sempre iguais, ainda não foram
terminadas – mas que elas vão sempre mudando.
Afinam ou desafinam. Verdade maior."*
(João Guimarães Rosa, Grande Sertão: Veredas)

Resumo

No problema clássico de Kepler, existe uma simetria dinâmica cuja carga conservada é um vetor conhecido como vetor de Laplace-Runge-Lenz. Sua existência, em conjunto com as simetrias usuais típicas de potenciais centrais, permite que se derive de maneira puramente algébrica o espectro do átomo de hidrogênio na mecânica quântica não relativística. Além disso, esta simetria é o que explica a degeneração dos níveis de energia. A combinação das componentes do momento angular com as do vetor de Laplace-Runge- Lenz, faz com que o grupo de simetria do átomo de hidrogênio seja não simplesmente $SO(3)$, mas sim $SO(4)$ (no caso do espectro discreto) ou $SO(3,1)$ (no caso do espectro contínuo). Assim, o grupo de Lorentz, $SO(3,1)$, aparece como simetria dinâmica em um problema não-relativístico, fora do contexto da Relatividade Restrita.

Palavras-chaves: átomo de hidrogênio. simetria dinâmica. problema de Kepler.

Abstract

In the classical Kepler problem, there is a dynamic symmetry whose conserved charge is a vector known as Laplace-Runge-Lenz vector. It's existence, along with the usual symmetries present in central potentials, allows one to derive in a purely algebraic way the spectrum of the hydrogen atom in non-relativistic quantum mechanics. Furthermore, this symmetry explains the degeneracy of the energy levels. The combination of the components of the angular momentum vector with the Laplace- Runge-Lenz vector, makes the symmetry group of the hydrogen atom not just $SO(3)$, but $SO(4)$ (in the case of discrete spectrum) or $SO(3,1)$ (in the case of continuous spectrum). Thus, the Lorentz group, $SO(3,1)$, appears as a dynamic symmetry in a non-relativistic problem, outside the context of relativity.

Key-words: hydrogen atom. dynamic symmetry. Kepler problem.

Sumário

Introdução

Uma Lei de Conservação estabelece que determinada propriedade mensurável – energia, momento angular, carga elétrica, bariônica, etc – cuja origem está nas simetrias das diferentes formas de interações fundamentais da matéria e do espaço-tempo. Tais leis fazem parte de um conjunto de princípios básicos que as teorias físicas devem obedecer e, matematicamente, as transformações que dão origem às simetrias são elementos de um grupo. Por este motivo, nos últimos 100 anos, os métodos da teoria de grupos e suas correspondentes álgebras se firmaram como uma das principais ferramentas da física teórica.

O exemplo mais característico de como um grupo descreve o espaço-tempo reside na simples ideia de que as leis da Natureza devem ser as mesmas para uma certa classe de observadores, resultando nos Princípios de Relatividade. Na Relatividade Restrita, as Equações de Maxwell são invariantes sob a ação do Grupo de Poincaré, $R^4 \rtimes SO(3,1)$, estabelecendo a equivalência entre observadores inerciais relacionados pelas conhecidas Transformações de Lorentz (e de Poincaré), que fornecem a base da geometria do espaço-tempo de Minkowski.

Já na descrição quântica dos campos relativísticos que formam a matéria, existem simetrias chamadas *simetrias internas*. Ao contrário das transformações de Lorentz, estas não representam transformações do espaço-tempo, mas relacionam as próprias partículas entre si. Um exemplo importante é a aplicação de representações de certos grupos unitários, $SU(3)\otimes SU(2)\otimes U(1)$, na classificação das partículas elementares envolvidas nas interações forte e eletrofraca.

De um modo geral, os métodos algébricos da teoria de grupos possuem um papel importante na descrição das simetrias de um sistema físico com uma dada Hamiltoniana, e das correspondentes leis de conservação de certas grandezas, conhecidas como cargas. Isto se manifesta já na mecânica clássica, e se faz particularmente importante na mecânica quântica, onde apenas os operadores correspondentes às cargas conservadas são passíveis de serem medidos simultaneamente à energia.

É o caso do momento angular de uma partícula em um potencial central, o exemplo mais importante da ligação entre um grupo de simetria – neste caso, o grupo das rotações, $SO(3)$ – é uma grandeza dinâmica observável na mecânica quântica não-relativística. As componentes do vetor momento angular são os geradores infinitesimais da álgebra de Lie do grupo $SO(3)$, e por isso se conservam. Mais ainda, os espectros discretos do módulo do momento angular e de uma das suas componentes podem ser derivados diretamente a partir destas suas propriedades algébricas.

Além das simetrias de rotação, translação, etc., ligadas diretamente às simetrias do espaço e do tempo, certos potenciais de interação podem apresentar outras simetrias específicas, chamadas de *simetrias dinâmicas*. O exemplo mais famoso é o potencial de Coulomb: existe uma simetria dinâmica cuja carga conservada é um vetor conhecido como vetor de Laplace-Runge-Lenz, responsável, na mecânica clássica, pelo fato de existirem órbitas fechadas no problema de Kepler. A combinação das componentes do momento angular com as do vetor de Laplace-Runge-Lenz, no caso do átomo de hidrogênio faz com que o seu grupo de simetria seja não simplesmente $SO(3)$, mas sim $SO(4)$ (no caso do espectro discreto) ou $SO(3,1)$ (no caso do espectro contínuo). Desta forma o grupo de Lorentz, $SO(3,1)$, aparece como simetria dinâmica em um problema não-relativístico, fora do contexto da Relatividade Restrita. Isto é o que explica a degenerescência do espectro de energia do átomo, e permite derivá-lo de maneira puramente algébrica.

Esta monografia é dedicada ao estudo de simetria em mecânica quântica não-relativística, mais precisamente do uso dos métodos algébricos (representados pela teoria dos grupos e álgebras de Lie) para construção dos espaços de Hilbert de certos sistemas que apresentam simetrias dinâmicas.

1 Conceitos Básicos de Mecânica Quântica

1.1 Mecânica Clássica

A estrutura básica da formulação Lagrangiana para um sistema físico é baseada na utilização de n coordenadas generalizadas $(q_1, \ldots, q_n)$ na construção de uma função $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ denominada Lagrangiana que depende destas coordenadas, de suas derivadas e possivelmente do tempo, e consiste num conjunto de n equações diferenciais de segunda ordem no tempo,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \qquad i = 1, \ldots, n. \tag{1.1}$$

A formulação Hamiltoniana é baseada na substituição destas n equações diferenciais de segunda ordem no tempo por um conjunto de $2n$ equações diferenciais de primeira ordem, através da substituição das velocidades $\dot{q}_i$ pelos momentos canônicos conjugados, definidos por:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \tag{1.2}$$

e tais que $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q, p)$. [1]

A Hamiltoniana é definida por

$$H(q_i, p_i, t) = p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t). \tag{1.3}$$

Derivando ambos os lados da equação acima, obtemos as equações de Hamilton,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \tag{1.4}$$

A Lagrangiana usual é $L = T - V$, sendo T a energia cinética e V a energia potencial. Se T é uma função puramente quadrática das velocidades e V independe das velocidades, então,

$$H = T + V = E, \tag{1.5}$$

isto é, a Hamiltoniana é a energia total expressa como função das coordenadas e momentos. (LEMOS, 2007)

[1] Esta substituição é uma transformação de Legendre, e só é possível sob a condição de que

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_a \partial \dot{q}_b}\right) \neq 0.$$

As quantidades (q, p) são denominadas variáveis canônicas e o espaço cartesiano $2n$-dimensional cujos pontos são representados por $(q, p) = (q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ é denominado espaço de fase.

Considere um funcional arbitrário $G(q_i, p_i, t)$. Calculando sua derivada e expressando-a em termos das equações de Hamilton,

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= \frac{\partial G}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial G}{\partial t} \\ &= \frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial G}{\partial t}. \end{aligned} \tag{1.6}$$

O parêntese de Poisson é uma aplicação que a quaisquer duas funções do espaço de fase A, B associa uma terceira função, denotada por $\{A, B\}$, de acordo com a regra:

$$\{A, B\} \equiv \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}, \tag{1.7}$$

em especial, os parênteses de Poisson fundamentais:

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \qquad \{p_i, p_j\} = 0, \qquad \{q_i, q_j\} = 0. \tag{1.8}$$

Os parênteses de Poisson possuem as seguintes propriedades algébricas:

- Antissimetria: $\{A, B\} = -\{B, A\}$.
- Bilinearidade: $\{\alpha A + \beta B, C\} = \alpha\{A, C\} + \beta\{B, C\}$, α, β independem de (q, p).
- Identidade de Jacobi: $\{A, \{B, C\}\} + \{C, \{A, B\}\} + \{B, \{C, A\}\} = 0$.
- $\{AB, C\} = A\{B, C\} + \{A, C\}B$; e $\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}$.

A expressão (1.6) pode ser escrita em termos do parêntese de Poisson como:

$$\frac{dG}{dt} = \{G, H\} + \frac{\partial G}{\partial t}, \tag{1.9}$$

se o funcional G independe explicitamente do tempo,

$$\frac{dG}{dt} = \{G, H\}. \tag{1.10}$$

As equações de Hamilton podem escrever-se em termos do parêntese de Poisson, como

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \qquad \dot{p}_i = \{p_i, H\}. \tag{1.11}$$

E portanto, se $G(q_i, p_i)$ é constante,

$$\frac{dG}{dt} = 0 \Leftrightarrow \{G, H\} = 0, \tag{1.12}$$

a conservação, no sentido matemático, é equivalente ao desaparecimento do parêntese de Poisson.

1.2 Princípios da Mecânica Quântica

Um estado quântico de uma partícula é definido, num dado instante, pela função de onda $\psi(\mathbf{r})$. De acordo com a interpretação probabilística da função de onda, a grandeza,

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \tag{1.13}$$

representa a probabilidade de encontrar num tempo t, a partícula num volume d^3r sobre um ponto $\mathbf{r}$. A probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar do espaço deve ser igual a 1, portanto,

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \tag{1.14}$$

O conjunto das funções para as quais esta integral converge é chamado de funções quadrado-integráveis. Esse conjunto tem a estrutura de um espaço de Hilbert e é chamado de L^2. Outras condições físicas sobre as funções de onda são certas propriedades de regularidade, tais como ser definida em toda parte e contínua por partes, infinitamente diferenciável, e é um subespaço de L^2, chamado de $\mathscr{F}$, satisfazendo todos os critérios de um espaço vetorial. (COHEN-TANNOUDJII; DIU; LALOË, 1977)

Dado cada par de elementos de $\mathscr{F}$, $\phi(\mathbf{r})$ e $\psi(\mathbf{r})$, o produto escalar de $\psi(\mathbf{r})$ por $\phi(\mathbf{r})$ é definido por

$$(\phi, \psi) = \int d^3r\, \phi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}). \tag{1.15}$$

Se $(\phi, \psi) = 0$, $\phi(\mathbf{r})$ e $\psi(\mathbf{r})$ são ditos ortogonais. $\sqrt{(\psi, \psi)}$ é denominado norma de $\psi(\mathbf{r})$.

Um operador A, por definição, associa cada função $\phi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ a outra função $\phi'(\mathbf{r})$:

$$\phi'(\mathbf{r}) = A\phi(\mathbf{r}). \tag{1.16}$$

Sejam A e B dois operadores lineares. O produto AB é definido por

$$(AB)\psi(\mathbf{r}) = A(B\psi(\mathbf{r})), \tag{1.17}$$

B primeiro atua em $\psi(\mathbf{r})$, que resulta em $\phi(\mathbf{r}) = B\psi(\mathbf{r})$, assim A opera no novo funcional $\phi(\mathbf{r})$. Em geral, $AB \neq BA$. Denomina-se comutador de A e B o operador $[A, B]$ definido por

$$[A, B] \equiv AB - BA. \tag{1.18}$$

Considere um conjunto contável de funções de $\mathscr{F}$. O conjunto $\{u_i(\mathbf{r})\}$, $i = 1, \ldots, n$, é dito ortonormal se

$$(u_i, u_j) = \int d^3r\, u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}, \tag{1.19}$$

e constitui uma base completa de funções se cada função $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ pode ser expandida em termos de $u_i(\mathbf{r})$ como

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}). \tag{1.20}$$

Uma formulação alternativa é descrever cada estado por um vetor $|\ \rangle$, chamado de ket, em um espaço vetorial $\mathscr{E}_r$. Cada estado $|\psi\rangle$ está associado a uma função quadrado-integrável:

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \mathscr{E}_r. \tag{1.21}$$

Com cada par de kets $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$, o produto escalar pode ser definido como $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ e satisfaz a propriedade (1.15).

Um conjunto de funcionais lineares definidos nos kets $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ constitui um espaço vetorial denominado espaço dual de $\mathscr{E}$ e simbolizado por $\mathscr{E}^*$. Qualquer elemento do espaço-$\mathscr{E}^*$ é chamado de bra e é representado pelo símbolo $\langle\ |$, e o produto escalar escreve-se como:

$$(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle \tag{1.22}$$

Um operador linear A associa com cada ket $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ outro ket $|\psi\rangle' \in \mathscr{E}$:

$$|\psi\rangle' = A|\psi\rangle \tag{1.23}$$

O produto AB de dois operadores lineares é definido por:

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle), \tag{1.24}$$

B primeiro atua em $|\psi\rangle$ para resultar no ket $B|\psi\rangle$, e depois A atua no ket $B|\psi\rangle$.

Sejam $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ dois kets. Denomina-se elemento da matriz de A entre $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$, o produto escalar

$$\langle\phi|(A|\psi\rangle). \tag{1.25}$$

A ação de um operador linear num bra pode ser escrita como:

$$(\langle\phi|A)|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle). \tag{1.26}$$

Um operador A é dito Hermitiano se é igual ao seu adjunto, isto é, se $A = A^\dagger$, e satisfaz para todo $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ a relação

$$\langle\psi|(A|\phi\rangle) = [\langle\phi|(A|\psi\rangle)]^* = \langle(\psi|A^\dagger)|\phi\rangle. \tag{1.27}$$

Um conjunto de kets, discretos $\{|u_i\rangle\}$ ou contínuos $\{|W_\alpha\rangle\}$ é ortonormal se satisfazem a condição de ortonormalização:

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \qquad \textit{ou} \qquad \langle W_\alpha|W_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha'), \tag{1.28}$$

e constituem uma base, se cada ket $|\psi\rangle$ pertencendo a $\mathscr{E}$ tem uma única expansão em $|u_i\rangle$ ou $|W_\alpha\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \qquad \textit{ou} \qquad |\psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha)\, |W_\alpha\rangle\,. \tag{1.29}$$

$|\psi\rangle$ possui um autovetor de um operador linear A se:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle\,, \qquad \lambda \in \mathbb{C}. \tag{1.30}$$

Essa equação possui solução apenas quando λ toma certos valores, denominados autovalores de A. O conjunto de autovalores é denominado espectro de A. O autovalor λ é dito não-degenerado quando seu autovetor correspondente é único. Se existem ao menos dois kets independentes autovetores de A com mesmo autovalor, é dito degenerado.

Os operadores Hermitianos possuem autovalores reais e autovetores ortogonais. Um operador Hermitiano A é um observável se seus vetores formam uma base no espaço dos estados. (ARFKEN; WEBER; HARRIS, 2010)

Se dois observáveis físicos comutam, uma base ortogonal do espaço dos estados pode ser construída com autovetores comuns a ambos. Um conjunto de observáveis que comutam podem então ser diagonalizados na mesma base, e medidos simultaneamente. Se estes observáveis são suficientes para descrever completamente o sistema, diz-se que os operadores formam um conjunto completo de observáveis que comutam.

1.3 Representações da Mecânica Quântica

1.3.1 Propriedades dos operadores unitários

Um operador T é unitário se sua inversa T^{-1} é igual ao seu adjunto $T^\dagger$:

$$TT^\dagger = T^\dagger T = \mathbb{1}. \tag{1.31}$$

Considere dois vetores arbitrários $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ de $\mathscr{E}$, e suas transformadas $|\psi'\rangle$ e $|\phi'\rangle$:

$$|\psi'\rangle = T|\psi\rangle\,, \qquad |\phi'\rangle = T|\phi\rangle\,. \tag{1.32}$$

Calculando o produto escalar $\langle\psi'|\phi'\rangle$, obtemos

$$\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\psi|T^\dagger T|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\,. \tag{1.33}$$

Uma transformação unitária associada com o operador T conserva o produto escalar.

Seja $\{|v_i\rangle\}$ uma base ortonormal discreta do espaço dos estados $\mathscr{E}$. Seja $\{|v_i'\rangle\}$ a transformada do vetor $\{|v_i\rangle\}$ sob a ação do operador T:

$$|v_i'\rangle = T\,|v_i\rangle\,, \tag{1.34}$$

assim,

$$\langle v_i'|v_j'\rangle = \langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}, \tag{1.35}$$

portanto, os vetores $|v_i'\rangle$ são ortonormais. Considere um vetor abstrato $|\psi\rangle$ de $\mathscr{E}$. Desde que o conjunto $\{|v_i\rangle\}$ constitua uma base, o vetor $T^\dagger\,|\psi\rangle$ pode ser expandido em $|v_i\rangle$:

$$T^\dagger\,|\psi\rangle = \sum_i c_i\,|v_i\rangle\,, \tag{1.36}$$

aplicado T nessa equação,

$$TT^\dagger\,|\psi\rangle = \sum_i c_i T\,|v_i\rangle\,, \tag{1.37}$$

assim,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i\,|v_i'\rangle\,. \tag{1.38}$$

Qualquer vetor $|\psi\rangle$ pode ser expandido nos vetores $|v_i'\rangle$. Para que o operador T seja unitário, os vetores de uma base ortonormal de $\mathscr{E}$, transformados por T, constituem outra base ortonormal.

1.3.2 Transformações unitárias dos operadores

A transformada A' do operador A é o operador cujos elementos de matriz na base $\{|v_i'\rangle\}$ são iguais aos elementos de matriz do operador A na base $\{|v_i\rangle\}$:

$$\langle v_i'|A'|v_j'\rangle = \langle v_i|A|v_j\rangle\,. \tag{1.39}$$

Substituindo (1.34) na equação acima,

$$\langle v_i|T^\dagger A' T|v_j\rangle = \langle v_i|A|v_j\rangle\,. \tag{1.40}$$

Assim, para i e j arbitrários,

$$T^\dagger A' T = A \Leftrightarrow A' = TAT^\dagger \tag{1.41}$$

1.3.3 Representações de Schrödinger e de Heisenberg

Na representação de Schrödinger os operadores que correspondem aos observáveis físicos do sistema são independentes do tempo. A evolução do sistema é inteiramente contida no estado vetorial $|\psi_S(t)\rangle$, e é obtida a partir da equação

$$\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_S(t)\right\rangle = H_S\left|\psi_S(t)\right\rangle, \tag{1.42}$$

sendo H_S o operador Hamiltoniano do sistema, com o estado inicial

$$|\psi_S(t=0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \tag{1.43}$$

determinando a dinâmica do sistema. A evolução do estado vetorial pode ser descrita como um mapeamento do estado inicial pelo operador evolução temporal:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t)\left|\psi_S(0)\right\rangle, \tag{1.44}$$

que obedece a equação:

$$\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t) = H_S U(t). \tag{1.45}$$

Integrando a expressão acima, o operador evolução temporal toma a forma

$$U(t) = \exp\left(-\frac{\imath H_S t}{\hbar}\right), \tag{1.46}$$

quando H_S não depende do tempo. Este operador é unitário, devido ao fato que o operador Hamiltoniano é Hermitiano, e garante a condição inicial (1.44), i.e.

$$U(t=0) = \mathbb{1}. \tag{1.47}$$

O valor esperado de um operador arbitrário A nessa representação é dado por

$$A = \langle\psi_S(t)|A_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(0)|U^\dagger(t)A_S U(t)|\psi_S(0)\rangle\,. \tag{1.48}$$

Existe uma formulação alternativa à representação de Schrödinger, conhecida como representação de Heisenberg, em que os operadores evoluem no tempo, mas os vetores não. Através da transformação associada com o operador $U^\dagger$ na equação (1.43), obtemos o estado transformado $|\psi_H\rangle$:

$$|\psi_H\rangle = U^\dagger(t)\left|\psi_S(t)\right\rangle = \left|\psi_S(0)\right\rangle, \tag{1.49}$$

na representação de Heisenberg o estado é constante, e igual a $|\psi_S(t)\rangle$ no tempo $t = 0$. Assim, os operadores evoluem no tempo de acordo com

$$A_H(t) = U^\dagger(t)A_S U(t). \tag{1.50}$$

A partir da definição acima, a equação do movimento para operadores dependentes do tempo na representação de Heisenberg é

$$\imath\hbar\frac{d}{dt}A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)], \tag{1.51}$$

com $H_H = U^\dagger H_S U$. A equação acima é conhecida como equação de Heisenberg.

A equação de Heisenberg possui uma ligação com as equações de Hamilton da mecânica clássica. O comutador $[u_1u_2, v_1v_2]$ pode ser calculado em duas diferentes formas:

$$\begin{aligned}[u_1u_2, v_1v_2] &= [u_1, v_1v_2]u_2 + u_1[u_2, v_1v_2] \\ &= [u_1, v_1]v_2u_2 + v_1[u_1, v_2]u_2 + u_1[u_2, v_1]v_2 + u_1v_1[u_2, v_2],\end{aligned} \tag{1.52}$$

e

$$\begin{aligned}[u_1u_2, v_1v_2] &= [u_1u_2, v_1]v_2 + v_1[u_1u_2, v_2] \\ &= [u_1, v_1]u_2v_2 + u_1[u_2, v_1]v_2 + v_1[u_1, v_2]u_2 + v_1u_1[u_2, v_2].\end{aligned} \tag{1.53}$$

Igualando (1.52) e (1.53), obtemos

$$[u_1, v_1](u_2v_2 - v_2u_2) = (u_1v_1 - v_1u_1)[u_2, v_2] \tag{1.54}$$

Desde que essa relação mantenha u_1 e v_1 independentes de u_2 e v_2, segue-se que

$$u_1v_1 - v_1u_1 = \imath\hbar[u_1, v_1], \tag{1.55}$$

$$u_2v_2 - v_2u_2 = \imath\hbar[u_2, v_2]. \tag{1.56}$$

O comutador, ou parêntese de Poisson quântico, $[u, v]$ de quaisquer duas variáveis u e v é definido por

$$uv - vu = \imath\hbar[u, v]. \tag{1.57}$$

Nesse procedimento, desenvolvido por Dirac, pode-se *quantizar* um sistema clássico substituindo as variáveis dinâmicas por operadores Hermitianos e substituindo os parênteses de Poisson do espaço de fase por comutadores. Com isso, a equação de evolução (1.10) transforma-se na equação de Heisenberg. Além disso, os parênteses de Poisson canônicos (1.8) transformam-se nas relações de comutação fundamentais de Heisenberg:

$$[q_i, p_j] = \imath\hbar\delta_{ij}, \qquad [p_i, p_j] = 0, \qquad [q_i, q_j] = 0. \tag{1.58}$$

As equações acima fornecem a base para a analogia entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. O resultado clássico é obtido no limite $\hbar \to 0$, assim a mecânica clássica pode ser considerada como o caso limite da mecânica quântica quando $\hbar$ vai a zero. Na mecânica clássica, cada par de coordenada generalizada e seu momento conjugado, q_i e p_i, correspondem a um diferente grau de liberdade do sistema. Já na mecânica quântica, todas as variáveis dinâmicas correspondendo à diferentes graus de liberdade comutam. Apenas as variáveis correspondendo ao mesmo grau de liberdade podem deixar de comutar. (DIRAC, 1981)

Vale lembrar que nem todos os sistemas quânticos possuem um correspondente clássico como é o caso, por exemplo, da descrição do spin de partículas.

2 Grupos, Álgebras e Representações

2.1 Grupos e Álgebra de Lie

2.1.1 Definição de Grupo

Um grupo $\mathscr{G}$ pode ser definido como um conjunto G munido de um produto $\cdot$ que satisfaz as seguintes quatro condições (HAMERMESH, 1989):

1. Se a e b são dois quaisquer elementos de G, então o produto $a \cdot b$ também é um elemento de G;
2. A multiplicação é associativa, $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$;
3. Existe um elemento unitário $e \in G$ tal que $e \cdot a = a \cdot e = a$, $\forall\, a \in G$;
4. Existe uma inversa de cada elemento: o conjunto deve conter um elemento $b = a^{-1}$ tal que $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$, $\forall\, a \in G$.

2.1.2 Definição de Grupo de Lie

Um grupo de Lie $\mathscr{G}$ é um grupo parametrizado por n parâmetros contínuos. Se representarmos G com matrizes g, um elemento $g \in G$ pode ser escrito como a função contínua:

$$g(\theta_i), \qquad i = 1, \dots, n; \qquad \theta_i \in \mathbb{R}, \tag{2.1}$$

e $g|_{\theta_i=0} = \mathbb{1}$, sendo $\mathbb{1}$ o elemento unitário. Assim, para argumentos infinitesimais $\delta\theta_i$,

$$g(\delta\theta_k) = \mathbb{1} + \imath\delta\theta_k l_k, \qquad \text{com } l_k = -\imath \frac{dg}{d\theta_k}(\theta_k)\bigg|_{\theta_k=0}, \tag{2.2}$$

onde definimos $\hbar = 1$.
Uma transformação finita $g(\theta_i)$ pode ser composta de transformações infinitesimais sucessivas. Para N transformações com $N \to \infty$, seja $\delta\theta_i = \theta_i/N$, então

$$g = \lim_{N\to\infty} \left[1 + \left(\frac{\imath\theta_i}{N}\right) l_i\right]^N = \exp\left(\imath\theta_i l_i\right). \tag{2.3}$$

Assim cada elemento $g(\theta_i)$ do grupo pode ser mapeado na forma exponencial $g(\theta_i) = \exp\left(\imath\theta_i l_i\right)$, e as matrizes l_i são os geradores do grupo.

Uma álgebra de Lie é um espaço vetorial $\mathscr{V}$ munido das propriedades usuais de soma e produto por escalar, mais uma operação denominada produto de Lie, $[f, g]$, $f, g \in \mathscr{V}$, que obedece às propriedades:

1. Antissemtria: $[f, g] = -[g, f]$.
2. Bilinearidade: $[f, \alpha g + \beta h] = \alpha[f, g] + \beta[f, h]$; α, β independem de $\mathscr{V}$.
3. Identidade de Jacobi: $[\alpha, [\beta, \gamma]] + [\gamma, [\alpha, \beta]] + [\beta, [\gamma, \alpha]] = 0$.

A álgebra de um grupo de Lie é a álgebra de seus geradores. Alguns exemplos de Álgebras de Lie:

- $\mathbb{R}^3$, munido do produto vetorial: $[\mathbf{V}, \mathbf{W}] = \mathbf{V} \times \mathbf{W}$.
- Funções sobre o espaço de fase na mecânica clássica, munidas do parênteses de Poisson: $[f, g] = \{f, g\}$.
- Espaço vetorial de matrizes $n \times n$ munido do comutador: $[A, B] = AB - BA$.

2.2 O Grupo SO(n)

Uma matriz cuja transposta é igual a inversa, é dita ortogonal.

O conjunto de todas as matrizes ortogonais, munido da operação de multiplicação usual entre matrizes forma um grupo, tendo as quatros condições satisfeitas:

1. O produto de quaisquer duas matrizes ortogonais é outra matriz ortogonal, pois
$$(R_1R_2)(R_1R_2)^\top = R_1R_2R_2^\top R_1^\top = \mathbb{1}. \tag{2.4}$$
2. A multiplicação de matrizes é associativa
$$R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3, \tag{2.5}$$
3. A matriz identidade $\mathbb{1}$, definida por
$$R\mathbb{1} = \mathbb{1}R = \mathbb{1}, \tag{2.6}$$
é uma matriz ortogonal.
4. A matriz inversa R^{-1}, definida por
$$RR^{-1} = R^{-1}R = \mathbb{1}, \tag{2.7}$$
é uma matriz ortogonal, uma vez que para matrizes ortogonais $R^\top = R^{-1}$, $\forall\, R$.

As rotações no espaço Euclidiano n-dimensional podem ser representadas pelo grupo $SO(n)$ formado pelas matrizes ortogonais $n \times n$. Uma matriz de rotação A pode ser expressa em termos de uma matriz Q $n \times n$ como:

$$A = \exp(\imath Q). \tag{2.8}$$

Como $\exp(\imath Q^\top) = A^\top = A^{-1} = \exp(-\imath Q)$,

$$Q = -Q^\top, \tag{2.9}$$

a matriz Q é antissimétrica, e o número de parâmetros em uma matriz antissimétrica é $n(n-1)/2$. Assim, os $n(n-1)/2$ parâmetros de $SO(n)$ podem ser organizados como:

$$\theta_{ij} = -\theta_{ji}, \tag{2.10}$$

e multiplicados por $n(n-1)/2$ matrizes antissimétricas M_{ij}:

$$A = \exp\left(\frac{\imath}{2}\theta_{ij}M_{ij}\right). \tag{2.11}$$

Note que ij não enumeram os elementos das matrizes M, mas sim as matrizes em si, cada uma delas antissimétricas, *i.e.* $(M_{ij})_{ab} = -(M_{ij})_{ba}$, e também $M_{ji} = -M_{ij}$, por conta da antissimetria de θ_{ij}. As matrizes M podem ser normalizadas como

$$(M_{ij})_{ab} = \imath(\delta_{ia}\delta_{jb} - \delta_{ib}\delta_{ja}). \tag{2.12}$$

O comutador dos geradores (2.12) pode ser expresso como:

$$\begin{aligned}
([M_{ij}, M_{kl}])_{ab} &= (M_{ij}M_{kl} - M_{kl}M_{ij})_{ab} = (M_{ij})_{ac}(M_{kl})_{cb} - (M_{kl})_{ac}(M_{ij})_{cb} \\
&= (\delta_{ia}\delta_{jc} - \delta_{ic}\delta_{ja})(\delta_{kc}\delta_{lb} - \delta_{kb}\delta_{lc}) - (\delta_{ka}\delta_{lc} - \delta_{kc}\delta_{la})(\delta_{ic}\delta_{jb} - \delta_{ib}\delta_{jc}) \\
&= \delta_{ik}(\delta_{la}\delta_{jb} - \delta_{ja}\delta_{bl}) + \delta_{jl}(\delta_{ka}\delta_{ib} - \delta_{ia}\delta_{kb}) + \delta_{il}(\delta_{ja}\delta_{kb} - \delta_{ka}\delta_{jb}) + \\
&+ \delta_{jk}(\delta_{ia}\delta_{lb} - \delta_{la}\delta_{ib}) \\
&= \imath(\delta_{ik}(M_{lj})_{ab} + \delta_{jl}(M_{ki})_{ab} + \delta_{il}(M_{jk})_{ab} + \delta_{jk}(M_{il})_{ab}) \\
&= -\imath(\delta_{ik}M_{jl} + \delta_{jl}M_{ik} - \delta_{il}M_{jk} - \delta_{jk}M_{il})_{ab},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$[M_{ij}, M_{kl}] = -\imath(\delta_{ik}M_{jl} + \delta_{jl}M_{ik} - \delta_{il}M_{jk} - \delta_{jk}M_{il}). \tag{2.13}$$

2.2.1 Geradores do grupo SO(3)

Considere o grupo que mantém a quantidade $x^2 + y^2 + z^2$ invariante no espaço Euclidiano tridimensional, E_3. Os vetores em E_3 são matrizes coluna. Matricialmente, a rotação do eixo x_i, $i = 1, 2, 3$, em torno da origem, atuando em E_3 pode ser representada como:

$$R(\theta_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta_1 & \sin\theta_1 \\ 0 & -\sin\theta_1 & \cos\theta_1 \end{pmatrix}, \qquad R(\theta_2) = \begin{pmatrix} \cos\theta_2 & 0 & -\sin\theta_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta_2 & 0 & \cos\theta_2 \end{pmatrix},$$

$$\text{e } R(\theta_3) = \begin{pmatrix} \cos\theta_3 & \sin\theta_3 & 0 \\ -\sin\theta_3 & \cos\theta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Usando a definição (2.2) nas matrizes acima, obtemos,

$$l_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\imath \\ 0 & \imath & 0 \end{pmatrix}, \qquad l_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ e} \qquad l_3 = \begin{pmatrix} 0 & -\imath & 0 \\ \imath & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.15}$$

três matrizes 3×3 independentes, antissimétricas, e que formam uma base no espaço de todas matrizes 3×3 antissimétricas. Ou seja, toda matriz antissimétrica A_{ab} pode ser escrita como:

$$A_{ab} = \alpha_i (l_i)_{ab}, \qquad \alpha_i \in \mathbb{C}. \tag{2.16}$$

A representação matricial dos geradores infinitesimais (2.15) pode ser expressa como:

$$(l_i)_{jk} = -\imath\epsilon_{ijk}, \tag{2.17}$$

com ϵ_{ijk} o tensor antissimétrico definido por

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{se } ijk = 123, 312, 231. \\ -1, & \text{se } ijk = 132, 213, 321. \\ 0, & \text{se } ijk = \text{resto}. \end{cases} \tag{2.18}$$

O comutador dos geradores (2.15) pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} ([l_i, l_j])_{kl} &= (l_i l_j)_{kl} - (l_j l_i)_{kl} = (l_i)_{km}(l_j)_{ml} - (l_j)_{km}(l_i)_{ml} \\ &= -\epsilon_{ikm}\epsilon_{jml} + \epsilon_{jkm}\epsilon_{iml} = -\epsilon_{mik}\epsilon_{mlj} + \epsilon_{mjk}\epsilon_{mli} \\ &= -\delta_{il}\delta_{kj} + \delta_{jl}\delta_{ki} = -\epsilon_{mij}\epsilon_{mlk} = \epsilon_{ijm}\epsilon_{mlk} \\ &= (\imath\epsilon_{ijm} l_m)_{kl}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$[l_i, l_j] = \imath\epsilon_{ijm} l_m. \tag{2.19}$$

A álgebra de Lie (2.19) corresponde à algebra $so(3)$ e é localmente isomórfica à algebra $su(2)$, portanto $so(3) \approx su(2)$. Os elementos de $SU(2)$ consistem de todas as matrizes unitárias 2×2 com determinante 1. A estrutura de $SU(2)$ é essencialmente a mesma como a de $SO(3)$ exceto que para cada rotação existem duas rotações em $SU(2)$, uma com sinal positivo e a outra com sinal negativo.

2.2.2 Geradores do grupo SO(4)

O grupo $SO(4)$ possui seis geradores que são definidos como

$$L_i = \tfrac{1}{2}\epsilon_{ijk}M_{jk}, \qquad\qquad K_i = M_{i4}, \tag{2.20}$$

com $i, j, k = 1, 2, 3$. A partir de (2.8) as matrizes acima são dadas explicitamente por

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \imath & 0 \\ 0 & -\imath & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\imath & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \imath & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ e } \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & \imath & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.21}$$

$$K_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \imath & 0 \\ 0 & -\imath & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ e } \quad K_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & -\imath & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.22}$$

Usando as relações de comutação (2.13) para as matrizes M_{ab}, a relação de comutação dos geradores $\mathbf{L}$ e $\mathbf{K}$ é dada por

$$[L_i, L_j] = \imath\epsilon_{ijk}L_k \qquad [L_i, K_j] = \imath\epsilon_{ijk}K_k \qquad [K_i, K_j] = \imath\epsilon_{ijk}L_k, \tag{2.23}$$

e os geradores $\mathbf{K}$ não formam um grupo. Definindo os seis parâmetros θ_{ij} em (2.10),

$$m_1 = \theta_{23} \qquad m_2 = \theta_{31} \qquad m_3 = \theta_{12} \qquad k_1 = \theta_{14} \qquad k_2 = \theta_{24} \qquad k_3 = \theta_{34}, \tag{2.24}$$

e usando as equações (2.8), (2.10) e (2.24), a matriz A pode ser expressa em termos dos geradores $\mathbf{L}$ e $\mathbf{K}$, com $\mathbf{m} \equiv (m_1, m_2, m_3)$ e $\mathbf{k} \equiv (k_1, k_2, k_3)$,

$$A(\mathbf{m}, \mathbf{k}) = \exp\left(\imath m_i L_i + \imath k_i K_i\right). \tag{2.25}$$

Para a construção das representações do grupo $SO(4)$, combina-se os geradores $\mathbf{L}$ e $\mathbf{K}$ como:

$$F_i = \frac{1}{2}(L_i + K_i) \qquad\qquad G_i = \frac{1}{2}(L_i - K_i), \tag{2.26}$$

cujos parâmetros são definidos por,

$$f_i = m_i + k_i \qquad\qquad g_i = m_i - k_i \tag{2.27}$$

e a matriz (2.25) pode ser representada em termos de F_i e G_i como:

$$A(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \exp\left(\imath f_i F_i + \imath g_i G_i\right), \tag{2.28}$$

satisfazendo as relações de comutação:

$$[F_i, F_j] = \imath\epsilon_{ijk}F_k \qquad [G_i, G_j] = \imath\epsilon_{ijk}G_k \qquad [F_i, G_j] = 0. \tag{2.29}$$

Devido à ultima relação de comutação (2.29), a matriz (2.28) pode ser escrita como:

$$A(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \exp(\imath f_i F_i) \exp(\imath g_i G_i). \tag{2.30}$$

Note que as matrizes F_i e G_i formam, separadamente, a álgebra $so(3)$, eq. (2.19). Isto mostra que a álgebra do grupo $SO(4)$ é isomórfica ao produto direto $so(4) \approx su(2) \otimes su(2)$.

2.2.3 Representação Unitária da Álgebra su(2)

Considere os geradores L_i do grupo de rotação $SO(3)$, que obedecem à álgebra (2.19)

$$[L_i, L_j] = \imath\epsilon_{ijk}L_i. \tag{2.31}$$

Pode-se encarar L_i como operadores sobre um espaço de Hilbert, cujos vetores (representando estados quânticos) denotamos por $|j, m\rangle$. Define-se um novo operador L^2,

$$L^2 = L_x L_x + L_y L_y + L_z L_z \tag{2.32}$$

que comuta com cada L_n $(n = 1, 2, 3)$.

$$[L^2, L_i] = 0. \tag{2.33}$$

É fácil ver que para $i = 3$,

$$\begin{aligned}[L_x L_x + L_y L_y + L_z L_z, L_z] &= L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x + L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y \\ &= 0,\end{aligned}$$

o mesmo vale para $i = 1$ e 2, e em forma mais compacta $[L^2, L_i] = 0$.

Autoestados simultâneos de L^2 e de uma componente L_i podem ser encontrados – somente uma componente L_i pode ser escolhida, uma vez que as componentes não comutam entre si. A componente L_z foi escolhida. Sejam λ e m os autovalores de L^2 e L_z respectivamente,

$$L^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle \tag{2.34}$$

$$L_z |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle. \tag{2.35}$$

É mais fácil trabalhar com os operadores não Hermitianos

$$L_\pm = L_x \pm \imath L_y, \tag{2.36}$$

para determinar os valores para λ e m.

Esses operadores satisfazem as relações de comutação

$$[L_+, L_-] = 2L_z \tag{2.37}$$

$$[L_z, L_\pm] = \pm L_\pm \tag{2.38}$$

$$[L^2, L_\pm] = 0, \tag{2.39}$$

e seu produto pode ser expresso como:

$$L_\pm L_\mp = (L_x \pm \imath L_y)(L_x \mp \imath L_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp \imath(L_x L_y - L_y L_x)$$

$$L_\pm L_\mp = L^2 - L_z^2 \pm \imath L_z. \tag{2.40}$$

Atuando L_z em $(L_\pm |\lambda, m\rangle)$,

$$\begin{aligned} L_z(L_\pm |\lambda, m\rangle) &= ([L_z, L_\pm] + L_\pm L_z) |\lambda, m\rangle \\ &= (m \pm 1)(L_\pm |\lambda, m\rangle); \end{aligned} \tag{2.41}$$

logo, $L_\pm$ muda o autovalor de L_z por uma unidade, entretanto, não muda o valor de L^2,

$$\begin{aligned} L^2(L_\pm |\lambda, m\rangle) &= L_\pm(L^2 |\lambda, m\rangle) \\ &= \lambda(L_\pm |\lambda, m\rangle). \end{aligned} \tag{2.42}$$

Suponha a aplicação de L_+ sucessivamente n vezes sobre os autoestados simultâneos de L^2 e L_z. Assim é obtido um outro autoestado de L^2 e L_z, com o autovalor de L_z aumentado por n enquanto L^2 possui o mesmo autovalor.

Como o valor esperado de L^2 é $\langle L^2\rangle = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + \langle L_z^2\rangle$, com $\langle L_x^2\rangle = \langle \lambda, m|L_x^2|\lambda, m\rangle = \langle L_x(\lambda, m)|L_x(\lambda, m)\rangle \geq 0$ (identicamente para L_y), então, $\lambda = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + m^2 \geq m^2$. Ou seja,

$$\lambda \geq m^2. \tag{2.43}$$

Como, $m^2 \leq \lambda$; logo $|m|$ é limitado. Mas toda vez que se atua com L_+, $|m|$ aumenta. Portanto tem que haver um autovalor m_{max} tal que

$$L_+ |\lambda, m_{max}\rangle = 0, \tag{2.44}$$

e pela equação (2.40), obtém-se o autovalor máximo m_{max} de m,

$$\begin{aligned} (L^2 - L_z^2 - L_z) |\lambda, m_{max}\rangle &= 0 \\ \lambda - m_{max}^2 - m_{max} &= 0 \\ \lambda &= m_{max}(m_{max} + 1). \end{aligned} \tag{2.45}$$

Similarmente, têm-se o autovalor m_{min} quando

$$L_- \left|\lambda, m_{min}\right\rangle = 0, \tag{2.46}$$

e conclui-se que

$$\lambda = m_{min}(m_{min} - 1). \tag{2.47}$$

Comparando a equação (2.45) com a (2.47), a única solução possível é

$$m_{max} = -m_{min}. \tag{2.48}$$

Aplicando L_- sucessivamente n vezes sobre $\left|\lambda, m_{max}\right\rangle$,

$$m_{max} = m_{min} + n, \tag{2.49}$$

e substituindo (2.48) em (2.49),

$$m_{max} = \frac{n}{2}. \tag{2.50}$$

Definindo $m_{max} \equiv j$,

$$j = \frac{n}{2}, \tag{2.51}$$

sendo j um número inteiro ou semi-inteiro.
O valor máximo do autovalor de L_z é j. A equação (2.45) implica que os autovalores de L^2 são dados por

$$\lambda = j(j+1). \tag{2.52}$$

Evidentemente os autovalores de L_z são m, sendo que m vai de $-j$ a j em n passos inteiros. Em termos de $\left|j, m\right\rangle$, os auto-estados simultâneos de L^2 e L_z podem ser escritos como

$$L^2 \left|j, m\right\rangle = j(j+1) \left|j, m\right\rangle \ , \qquad\qquad j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \tag{2.53}$$

e

$$L_z \left|j, m\right\rangle = m \left|j, m\right\rangle , \qquad\qquad |m| \leq j. \tag{2.54}$$

A representação de $SO(3)$ equivale apenas aos valores inteiros de j. Os valores semi-inteiros em (2.53) são devidos ao fato de que $SU(2)$ é uma extensão central de $SO(3)$. (FRAMPTON; KEPHART; ROHM, 2009)

2.3 O Grupo de Lorentz Restrito

Para dois referenciais em movimento relativo ao longo do eixo x^1, a transformação de Lorentz que os relaciona é:

$$x'^0 = \gamma(x^0 - \beta x^1) = x^0 \cosh u - x^1 \sinh u \tag{2.55}$$

$$x'^1 = \gamma(x^1 - \beta x^0) = x^1 \cosh u - x^0 \sinh u \tag{2.56}$$

$$x'^2 = x^2 \tag{2.57}$$

$$x'^3 = x^3, \tag{2.58}$$

onde $\gamma = (1-\beta^2)^{-1/2}$, $\beta = v/c$, $\tanh u = \beta$, v é a velocidade relativa dos referenciais.

O grupo $SO(3,1)$ é chamado de grupo de Lorentz. As transformações de Lorentz homogêneas são transformações lineares contínuas Λ sobre as coordenadas de um quadrivetor,

$$x^\mu \longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu, \tag{2.59}$$

preservando a norma,

$$(x^0)^2 - (x^i)^2 = (x'^0)^2 - (x'^i)^2 = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu, \tag{2.60}$$

onde $g_{\mu\nu}$ é a métrica de Minkowski, $i = 1,2,3$, para as três coordenadas espaciais, e $\mu = 0,1,2,3$, para as coordenadas quadridimensionais do espaço-tempo.

A transformação de Lorentz homogênea mais geral é uma transformação linear

$$x'^\nu = \Lambda^\nu{}_\mu x^\mu, \tag{2.61}$$

os coeficientes da transformação $\Lambda^\nu{}_\mu$ são todos reais. A invariância requer que

$$x'^\mu x'_\mu \Rightarrow (\Lambda^\mu{}_\rho x^\rho)(\Lambda_\mu{}^\sigma x_\sigma) = \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda_\mu{}^\sigma x^\rho x_\sigma = x^\mu x_\mu \Leftrightarrow \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda_\mu{}^\sigma = \Lambda^{\sigma\mu}\Lambda_{\rho\mu} = \delta^\sigma{}_\rho. \tag{2.62}$$

Pode-se escrever a expressão acima na forma

$$\Lambda^\mu{}_\nu g_{\mu\rho} \Lambda^\rho{}_\sigma = g_{\nu\sigma} \Leftrightarrow \Lambda^\top g \Lambda = g, \tag{2.63}$$

sendo $\det \Lambda = \pm 1$, e a inversa de Λ é dada por $(\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu = \Lambda_\nu{}^\mu$. Uma transformação de Lorentz com determinante $+1$ é dita própria, e é dita imprópria se o determinante é -1.

Tomando $\nu = \sigma = 0$ em (2.63), obtêm-se

$$1 = g_{00} = \Lambda^\mu{}_0 g_{\mu\rho} \Lambda^\rho{}_0 = (\Lambda^0{}_0)^2 - (\Lambda^1{}_0)^2 - (\Lambda^2{}_0)^2 - (\Lambda^3{}_0)^2, \tag{2.64}$$

ou seja,

$$(\Lambda^0{}_0)^2 = 1 + (\Lambda^1{}_0)^2 + (\Lambda^2{}_0)^2 + (\Lambda^3{}_0)^2, \tag{2.65}$$

e finalmente,

$$\Lambda^0{}_0 \geq +1, \qquad ou \qquad \Lambda^0{}_0 \leq -1. \tag{2.66}$$

As transformações com $\Lambda^0{}_0 \geq +1$ são ditas ortócronas (preservam o sentido do tempo). As transformações com $\Lambda^0{}_0 \leq -1$ são ditas não-ortócronas (invertem o sentido do tempo). O conjunto das transformações próprias e ortócronas são chamadas de transformações de Lorentz restritas, e forma um subgrupo chamado de grupo de Lorentz restrito. (LEMOS, 2007)

O grupo de Lorentz restrito é um grupo de seis parâmetros contínuos, sendo três das rotações no espaço-tempo em torno dos eixos x_i, descritos em (2.15), e escritos como

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\imath \\ 0 & 0 & \imath & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\imath & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ e } \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\imath & 0 \\ 0 & \imath & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.67}$$

e os outros três devido às transformações de referenciais inerciais, denominados boosts, ao longo dos eixos x_i. As matrizes para os boosts de Lorentz são dadas explicitamente por

$$K_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\imath & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\imath & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ e } \quad K_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\imath \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.68}$$

Esses geradores satisfazem à seguinte álgebra

$$[L_i, L_j] = \imath\epsilon_{ijk}L^k, \qquad [L_i, K_j] = \imath\epsilon_{ijk}K^k, \qquad [K_i, K_j] = -\imath\epsilon_{ijk}L^k. \tag{2.69}$$

Os boosts de Lorentz, juntos, não formam um grupo. Analogamente à representação (2.20), os geradores **L** e **K** do grupo de Lorentz restrito são relacionados pela matriz $M^{\mu\nu}$ como

$$L^i = \tfrac{1}{2}\epsilon^{ijk}M_{jk}, \qquad K^i = M^{0i}, \tag{2.70}$$

e as matrizes do grupo de Lorentz assumem a forma

$$\Lambda = \exp\left(\imath\theta_{\mu\nu}M^{\mu\nu}\right). \tag{2.71}$$

Para a construção das representações do grupo $SO(3,1)$ complexa-se os geradores **L** e **K** como

$$A_i = \frac{1}{2}(L_i + \imath K_i) \qquad B_i = \frac{1}{2}(L_i - \imath K_i), \tag{2.72}$$

satisfazendo as relações de comutação

$$[A_i, A_j] = \imath\epsilon_{ijk}A^k \qquad [B_i, B_j] = \imath\epsilon_{ijk}B^k \qquad [A_i, B_j] = 0. \tag{2.73}$$

Note que as matrizes A_i e B_i formam, separadamente, a álgebra $so(3)$, eq. (2.19). Isto mostra que a álgebra do grupo de Lorentz é isomórfica ao produto direto $so(3,1) \approx su(2) \otimes su(2)$.

3 Simetrias e Leis de Conservação

3.1 Introdução

Matematicamente, uma função f das coordenadas e velocidades generalizadas é uma constante de movimento se

$$\frac{df}{dt}(q_i, \dot{q}_i, t) = 0. \tag{3.1}$$

Frequentemente não conhecemos a solução exata das equações de movimento. Mas graças às constantes de movimento, podemos obter informações importantes quanto à natureza do problema estudado, sem a necessidade da resolução completa do problema dinâmico.

Seja q_i uma coordenada cíclica da Lagrangiana. A equação (1.1) expressa em termos do momento conjugado (1.2), reduz-se a

$$\frac{dp_i}{dt} = 0, \tag{3.2}$$

isto é, o momento conjugado associado a uma coordenada cíclica é uma constante de movimento. A alteração no valor de q_i não modifica a Lagrangiana.

A ausência de uma certa coordenada pode ser interpretada como uma propriedade de simetria. As leis físicas são invariantes sob operações de simetria. A existência de uma relação entre as leis de conservação e a invariância dos sistemas físicos sob operações de simetria na dinâmica Lagrangiana é estabelecida pelo teorema de Noether.

3.2 As simetrias geram cargas conservadas

Considere um sistema dinâmico descrito pelas equações de movimento obtidas a partir da ação:

$$S = \int_{t_i}^{t_f} dt L(q_i, \dot{q}_i, t). \tag{3.3}$$

Suponha que S seja invariante sob um conjunto de transformações de variáveis dinâmicas

$$q(t) \to q'(t) = f(q(t), \dot{q}(t)), \tag{3.4}$$

onde $f(q(t), \dot{q}(t))$ é um funcional de $q(t)$. Tais transformações são denominadas transformações de simetrias. Para uma transformação infinitesimal de simetria, a diferença

$$\delta q(t) = q'(t) - q(t), \tag{3.5}$$

é denominada variação de simetria, e possui a forma geral:

$$\delta q(t) = \epsilon\,\chi(q(t), \dot{q}(t), t), \tag{3.6}$$

sendo ϵ um parâmetro infinitesimal arbitrário.

A conexão entre invariância e quantidades conservadas na dinâmica Lagrangiana é estabelecida pelo teorema de Noether, desenvolvido a seguir. Sejam Υ e Ω_i duas funções conhecidas de variáveis reais. Considere a transformação infinitesimal:

$$t \longrightarrow t' = t + \epsilon\Upsilon(q(t), t) \tag{3.7a}$$
$$q_i(t) \longrightarrow q_i'(t') = q_i(t) + \epsilon\Omega_i(q(t), t). \tag{3.7b}$$

A ação permanece invariante sob essa transformação, se

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} L\left(q_i'(t), \frac{dq_i'(t')}{dt'}, t'\right) dt' - \int_{t_i}^{t_f} L\left(q_i(t), \frac{dq_i(t)}{dt}, t\right) dt = 0. \tag{3.8}$$

Derivando (3.7a), temos

$$\frac{dt'}{dt} = 1 + \epsilon\dot{\Upsilon}, \qquad \frac{dt}{dt'} = 1 - \epsilon\dot{\Upsilon}, \tag{3.9}$$

e também, derivando (3.7b),

$$\frac{dq_i'(t')}{dt'} = \frac{dt}{dt'}\frac{dq_i'(t')}{dt} = (1 - \epsilon\dot{\Upsilon})(\dot{q}_i + \epsilon\dot{\Omega}_i) = \dot{q}_i + \epsilon\Phi_i, \tag{3.10}$$

onde $\Phi_i = \dot{\Omega}_i - \dot{q}_i\dot{\Upsilon}$. Assim, a invariância da ação,

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} L(q_i + \epsilon\Omega_i, \dot{q}_i + \epsilon\Phi_i, t + \epsilon\Upsilon)(1 + \epsilon\dot{\Upsilon})dt - \int_{t_i}^{t_f} L(q_i, \dot{q}_i, t)dt \tag{3.11}$$
$$= \epsilon \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\Omega_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\Phi_i + \frac{\partial L}{\partial t}\Upsilon + L\dot{\Upsilon}\right) dt = 0, \tag{3.12}$$

é condicionada por:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}\Omega_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(\dot{\Omega}_i - \dot{q}_i\dot{\Upsilon}) + \frac{\partial L}{\partial t}\Upsilon + L\dot{\Upsilon} = 0. \tag{3.13}$$

Através da equação de Lagrange (1.1), a equação acima pode ser reescrita na forma

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(\Omega_i - \dot{q}_i\Upsilon) + L\Upsilon\right) = 0. \tag{3.14}$$

O teorema de Noether enuncia que para um dado sistema mecânico com n graus de liberdade, se a ação é invariante sob a transformação (3.7), então a carga

$$C = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(\Omega_i - \dot{q}_i\Upsilon) + L\Upsilon, \tag{3.15}$$

é constante do movimento. (LEMOS, 2007)

3.2.1 Invariância sob translações temporais

Considere uma Lagrangiana que não depende explicitamente do tempo. As transformações infinitesimais associadas são:

$$t' = t - \epsilon, \qquad \dot{x}(t') = x(t). \tag{3.16}$$

Sob essas transformações, as coordenadas transformam-se como:

$$\begin{aligned} \delta x(t) &= x'(t) - x(t) = x(t' + \epsilon) - x(t) \\ &= x(t') + \epsilon \dot{x}(t') = \epsilon \dot{x}(t). \end{aligned} \tag{3.17}$$

A variação de simetria da Lagrangiana assume a forma:

$$\begin{aligned} \delta L &= L(x'(t), \dot{x}'(t)) - L(x(t), \dot{x}(t)) \\ &= \frac{\partial L}{\partial x}\delta x(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta \dot{x}(t). \end{aligned} \tag{3.18}$$

Inserindo (3.17) em (3.18), e usando (1.1),

$$\delta L = \epsilon \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x}(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\ddot{x}(t) \right) = \epsilon \frac{dL}{dt}. \tag{3.19}$$

A carga conservada para esta transformação torna-se:

$$Q = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} - L(x, \dot{x}), \tag{3.20}$$

e reconhecemos a expressão (3.20) como a Hamiltoniana (1.3) do sistema.

3.2.2 Invariância sob translações espaciais

Sob uma translação espacial as coordenadas x_i transformam-se como:

$$x'_i = x_i + \epsilon_i, \tag{3.21}$$

sendo ϵ_i um parâmetro infinitesimal. A partir de (3.6) as translações infinitesimais tomam a forma:

$$\delta x_i = \epsilon_i, \tag{3.22}$$

e, sob essas transformações, a Lagrangiana transforma-se como:

$$\begin{aligned} \delta L &= L(x'_i(t), \dot{x}'_i(t), t) - L(x_i(t), \dot{x}_i(t), t) \\ &= \frac{\partial L}{\partial x_i}\delta x_i = \frac{\partial L}{\partial x_i}\epsilon_i = 0 \end{aligned} \tag{3.23}$$

A variação de simetria da Lagrangiana assume a forma

$$\delta L = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\delta x_i \right) = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right)\epsilon_i. \tag{3.24}$$

Comparando a expressão acima com (1.2) a carga conservada para cada componente x_i,

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}, \tag{3.25}$$

é simplesmente o momento canônico conjugado.

3.2.3 Invariância sob rotações

Sob rotações, as coordenadas x_i transformam-se como:

$$x'_i(t) = R_{ij}x_j(t), \tag{3.26}$$

sendo R_{ij} uma matriz ortogonal 3×3. Para transformações infinitesimais,

$$R_{ij} = \delta_{ij} - \epsilon_{ijk}\theta_k, \tag{3.27}$$

sendo θ_k um parâmetro infinitesimal, as rotações infinitesimais assumem a forma:

$$\delta x_i = -\theta_{ij}x_j, \qquad \text{com} \qquad \theta_{ij} \equiv \epsilon_{ijk}\theta_k. \tag{3.28}$$

A Lagrangiana transforma-se como:

$$\begin{aligned}\delta L &= L(x'_i(t), \dot{x}'_i(t), t) - L(x_i(t), \dot{x}_i(t), t) \\ &= \frac{\partial L}{\partial x_i}\delta x_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\delta \dot{x}_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\delta x_i\right) \qquad (3.29) \\ &= \frac{d}{dt}\left(\epsilon_{ijk}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\delta x_i\right)\theta_j. \qquad (3.30)\end{aligned}$$

Usando a definição do momento canônico (1.2), a equação (3.29) toma a forma:

$$\frac{d}{dt}L_i = \frac{d}{dt}(\epsilon_{ijk}x_j p_k), \tag{3.31}$$

e as cargas conservadas são as componentes do momento angular.

3.3 As cargas conservadas geram simetrias

As cargas conservadas H, L_i, p_k podem ser usadas para gerar as transformações de simetria, das quais foram derivadas.

Para uma Hamiltoniana da forma:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x), \tag{3.32}$$

o parêntese de Poisson de H com x toma a forma

$$\{H, x_i\} = \frac{1}{m}p_i = \dot{x}_i. \tag{3.33}$$

A carga associada à invariância do sistema sob translações temporais, é por definição (3.20), a Hamiltoniana, e

$$\delta x(t) = \epsilon\{H, x(t)\} = \epsilon \dot{x}_i(t). \tag{3.34}$$

A carga associada à invariância do sistema sob translações espaciais, é por definição (3.25), o momento canônico, e

$$\delta x_i(t) = -\epsilon_j \{p_j, x_i(t)\} = \epsilon_i. \tag{3.35}$$

A carga associada à invariância do sistema sob rotações espaciais, é por definição (3.31), o momento angular, e

$$\delta x_j = \theta_i \{L_i, x_j(t)\} = -\epsilon_{ijk} \theta_i x_k. \tag{3.36}$$

Dado um conjunto de cargas conservadas Q descrevendo leis de conservação para um dado modelo da mecânica clássica, pode-se definir a partir das transformações infinitesimais de x_i, p_i e t as leis de conservação na forma

$$\delta x_i = \{Q_k, x_i\} c_k, \qquad \delta p_i = \{Q_k, p_i\} c_k, \tag{3.37}$$

sendo c_k os parâmetros infinitesimais das transformações.

4 O vetor de Laplace-Runge-Lenz

4.1 Uma nova simetria no problema de Kepler

A Lagrangiana para o problema de Kepler,

$$L = \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{\kappa}{r}. \tag{4.1}$$

onde $\kappa = Ze^2$, é invariante sob rotações e translações temporais, e como consequência sua energia e momento angular são conservados:

$$\dot{L} = \{L_k, H\} = 0, \qquad \dot{H} = \{H, H\} = 0. \tag{4.2}$$

Entretanto L_k e H não são todas as simetrias do problema de Kepler. Existe mais uma carga conservada que decorre de uma simetria dinâmica (não associada a uma simetria do espaço-tempo) denominada vetor de Laplace-Runge-Lenz[1],

$$A_k = \frac{1}{m}\epsilon_{klm}p_l L_m - \frac{\kappa}{r}r_k. \tag{4.3}$$

As transformações (3.37) que as cargas conservadas A_k geram, assumem a forma:

$$\delta r_i = \{A_k, r_i\}c_k = \left(\frac{1}{m}p_l r_l \delta_{ki} - \frac{2}{m}p_i r_k + \frac{1}{m}r_i p_k\right)c_k, \tag{4.4a}$$

$$\delta p_i = \{A_k, p_i\}c_k = \left(\left(2H + \frac{3\kappa}{r}\right)\delta_{ki} - \frac{1}{m}p_i p_k - \kappa\frac{r_i r_k}{r^3}\right)c_k. \tag{4.4b}$$

Ao contrário das transformações do espaço (e do tempo) correspondentes, por exemplo, às simetrias do grupo de Lorentz – i.e. às simetrias de rotação, boosts, etc. –, as transformações (4.4) envolvem explicitamente os momentos e são portanto transformações de simetria do espaço de fase como um todo. Esse tipo de transformação, que dá origem ao vetor de Laplace-Runge-Lenz como carga conservada, é chamada de simetria dinâmica.

O espectro de muitos operadores Hermitianos pode ser determinado e estudado por meio dos métodos algébricos da teoria de grupos. Aqui o interesse é pelos métodos que envolvem as álgebras de Lie no problema do átomo de Hidrogênio, mas também existem problemas bastante interessantes similares à este, como o problema do oscilador clássico isotrópico. Os auto-espaços que correspondem aos elementos do espectro, podem ser identificados como representações unitárias.

Esse método contém alguns aspectos interessantes do problema de degenerescência, uma vez que a multiplicidade da representação é igual à degenerescência espectral, no caso de um espectro discreto. Em muitos casos uma degenerescência surge sem motivos óbvios. Entretanto essas degenerescências não são acidentais, mas elas ocorrem devido a uma certa simetria oculta do sistema. Logo, o sistema é naturalmente degenerado.

[1] No Apêndice A encontra-se a demonstração da conservação de **L** e **A**.

4.2 Álgebra das simetrias do problema de Kepler

A Hamiltoniana H e a componente L_i do momento angular formam a álgebra fechada

$$\{H, L_i\} = 0, \qquad \{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k, \tag{4.5}$$

e a componente A_i do vetor de Laplace-Runge-Lenz forma a álgebra completa

$$\{L_i, A_k\} = \epsilon_{ikl} A_l, \qquad \{A_l, A_k\} = -\frac{2H}{m}\epsilon_{lkm} L_m. \tag{4.6}$$

O vetor de Laplace-Runge-Lenz satisfaz as relações:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{A} = 0, \qquad |\mathbf{A}|^2 = \frac{2H}{m}L^2 + \kappa^2, \tag{4.7}$$

assim existem cinco quantidades conservadas no problema de Kepler. Em outros potenciais centrais, em que não há conservação de $\mathbf{A}$, existem apenas cinco cargas: as três componentes de $\mathbf{L}$, e a energia E.

Podemos encontrar outra relação entre $\mathbf{L}$ e $\mathbf{A}$. Tomando o produto interno de $\mathbf{A}$ e um vetor radial $\mathbf{r}$,

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{r} = Ar\cos\theta = \frac{1}{m}\mathbf{r}\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{L}) - \kappa r, \tag{4.8}$$

mas, a partir da relação

$$\mathbf{r}\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{L}) = \mathbf{L}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p}) = L^2,$$

podemos reescrever a equação (4.8) como

$$\frac{1}{r} = \frac{m\kappa}{L^2}\left(\frac{Acos\theta}{\kappa} + 1\right). \tag{4.9}$$

Sendo A uma constante, a cada rotação de $n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$, corresponde à mesma coordenada no espaço. Portanto a órbita é fechada no problema de Kepler.

Como os parênteses de Poisson da Hamiltoniana com todas as cargas conservadas desaparecem, os operadores A_k podem ser redefinidos como:

$$M_k \equiv \sqrt{\frac{m}{2E}}A_k, \tag{4.10}$$

para os estados contínuos ($H = E > 0$). A álgebra completa das simetrias do problema clássico de Kepler toma a forma:

$$\{M_k, M_l\} = -\epsilon_{klm} L_m, \qquad \{L_i, M_k\} = \epsilon_{ikm} M_m, \qquad \{L_i, L_k\} = \epsilon_{ikm} L_m, \tag{4.11}$$

que coincide com a álgebra do grupo de Lorentz (2.69).

Para os estados ligados, com energias negativas, pode-se definir:

$$\tilde{M}_k \equiv \sqrt{\frac{m}{-2E}} A_k, \tag{4.12}$$

e a álgebra completa toma a forma:

$$\{\tilde{M}_k, \tilde{M}_l\} = \epsilon_{klm} L_m, \qquad \{L_i, \tilde{M}_k\} = \epsilon_{ikm} \tilde{M}_m, \qquad \{L_i, L_k\} = \epsilon_{ikm} L_m, \tag{4.13}$$

que coincide com a álgebra (2.23), do grupo $SO(4)$.

4.3 Simetrias do Átomo de Hidrogênio

Na mecânica quântica, para o problema não-relativístico do átomo de hidrogênio, o operador análogo ao vetor de laplace-Runge-Lenz (4.3) deve ser Hermitiano, e portanto,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \kappa \frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{4.14}$$

Podemos escrever o operador correspondente ao vetor de Laplace-Runge-Lenz como:

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{1}{2m}(\epsilon_{ijk} p_j L_k - \epsilon_{ijk} L_j p_k) - \kappa \frac{x_i}{r} \\ &= \frac{1}{2m}(\epsilon_{ijk} p_j L_k - \epsilon_{ijk} p_k L_j + \epsilon_{ijk}[p_k, L_j]) - \kappa \frac{x_i}{r} \\ &= \frac{1}{2m}(\epsilon_{ijk} p_j L_k - \epsilon_{ijk} p_k L_j - \imath \epsilon_{ijk} \epsilon_{jkm} p_m) - \kappa \frac{x_i}{r} \\ &= \frac{1}{m}(\epsilon_{ijk} p_j L_k - \imath \delta_{im} p_m) - \kappa \frac{x_i}{r}, \end{aligned}$$

e de forma mais compacta,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \imath \mathbf{p}) - \kappa \frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{4.15}$$

Após algumas relações de comutação [2],

$$[\mathbf{A}, H] = 0, \qquad \mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0, \qquad |\mathbf{A}|^2 = \frac{2H}{m}(L^2 + 1) + \kappa^2 \tag{4.16}$$

Portanto, as relações clássicas (4.7) continuam válidas e temos ainda cinco cargas conservadas.

Os seis operadores momento angular e vetor de Laplace-Runge-Lenz consistem em 15 relações de comutação de permutações ciclícas:

$$[L_i, L_j] = \imath \epsilon_{ijk} L_k, \tag{4.17a}$$

$$[L_i, A_j] = \imath \epsilon_{ijk} A_k, \tag{4.17b}$$

$$[A_i, A_j] = -\frac{2\imath}{m} H \epsilon_{ijk} L_k \tag{4.17c}$$

[2] No Apêndice B encontram-se algumas deduções relevantes das propriedades algébricas desta seção.

Sozinho, o operador momento angular forma uma álgebra fechada, gerando o grupo $SO(3)$. Os operadores momento angular e vetor de Laplace-Runge-Lenz, não formam uma álgebra fechada – a não comutatividade de $\mathbf{A}$, significa que as quantidades A_x, A_y, A_z não podem simultaneamente ter valores definidos na mecânica quântica. (LANDAU et al., 1958)

Entretanto como a Hamiltoniana H independe do tempo e comuta com $\mathbf{L}$ e $\mathbf{A}$, assim podemos trabalhar com um subespaço do espaço de Hilbert que corresponde a um autovalor particular da energia E da Hamiltoniana H.

Para o espectro contínuo ($E > 0$), é conveniente substituir $\mathbf{A}$ por

$$\tilde{\mathbf{M}} \equiv \sqrt{\frac{m}{2E}}\mathbf{A}, \tag{4.18}$$

e a álgebra completa dos operadores (4.17) coincide com a álgebra do grupo de Lorentz.

Para o espectro discreto ($E < 0$), é conveniente substituir $\mathbf{A}$ por

$$\mathbf{M} \equiv \sqrt{-\frac{m}{2E}}\mathbf{A} \tag{4.19}$$

Agora os seis geradores $\mathbf{L}$ e $\mathbf{M}$, se combinados, formam a álgebra $so(4)$. Partindo das representações do grupo $SO(4)$, definimos:

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}) \qquad \mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M}), \tag{4.20}$$

cujas relações de comutação são:

$$[I_i, I_j] = \imath\epsilon_{ijk} I_k \tag{4.21}$$

$$[K_i, K_j] = \imath\epsilon_{ijk} K_k \tag{4.22}$$

$$[\mathbf{I}, H] = [\mathbf{K}, H] = \mathbf{0} \tag{4.23}$$

$$[\mathbf{I}, \mathbf{K}] = 0. \tag{4.24}$$

Assim, $\mathbf{I}$ e $\mathbf{K}$ constituem, cada, uma álgebra $su(2)$, com os autovalores

$$I^2 = j_I(j_I + 1), \qquad K^2 = j_K(j_K + 1), \qquad j_I, j_K = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \tag{4.25}$$

Existem agora dois invariantes

$$C \equiv I^2 + K^2 = \frac{1}{2}(L^2 + M^2), \qquad C' \equiv I^2 - K^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}, \tag{4.26}$$

que comutam com todos os geradores infinitesimais. Uma vez que $\mathbf{L}$ e $\mathbf{M}$ são ortogonais, a segunda equação (4.26) resulta $C' = 0$, e estamos lidando somente com a parte de O(4) na qual $I^2 = K^2$ (SCHIFF, 1947). Assim $j_I = j_K \equiv j$, e os possíveis valores do operador C são

$$C = 2j(j + 1), \qquad j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \tag{4.27}$$

A origem da degenerescência é oriunda do fato de que $j_I = j_K = j$, devido à relação $\mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0$. A terceira equação (4.16), junto com (4.19) e (4.26), resulta em

$$C = \frac{1}{2}(L^2 - \frac{m}{2E}A^2) = -\frac{1}{2} - \frac{m\kappa^2}{4E},$$

com a expressão (4.27),

$$E = -\frac{m\kappa^2}{2(2j+1)^2}. \tag{4.28}$$

A única restrição física é que $L^2 = l(l+1)$ tenha apenas valores inteiros de l. Mas desde que $\mathbf{L} = \mathbf{I} + \mathbf{K}$, pode-se ter qualquer valor variando de $|j_I - j_K| = 0$ para $j_I + j_K = 2j_K = n-1$ por passos inteiros.

Se $2j+1$ é identificado como o número quântico principal n, pode-se reconhecer uma expressão familiar para os níveis de energia em (4.28).

Com n tomando qualquer valor inteiro de 1 a ∞, e j tomando qualquer valor $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$. Como $\mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}) + \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M})$, para um dado $n = 2j+1$, os possíveis valores de L são $0, 1, 2, \ldots, 2j$, e isto mostra que a degenerescência dos níveis de energia é igual a:

$$\sum_{l=0}^{2j}(2l+1) = (2j+1)^2 = n^2, \tag{4.29}$$

e a equação (4.28) escreve-se como:

$$E_n = -\frac{m\kappa^2}{2n^2}. \tag{4.30}$$

Note que sem fixar $j_I = j_K$, os níveis de energia tornam-se

$$E = -\frac{m\kappa^2}{2(2j_I+1)(2j_K+1)}, \tag{4.31}$$

e não são degenerados.

Esse método de encontrar os níveis de energia do átomo de hidrogênio a partir das simetrias do problema de Kepler foi usado por Pauli simultânea e independentemente do tratamento de Schrödinger baseado na equação de onda. (BANDER; ITZYKSON, 1966)

Conclusão

O estudo de simetrias dinâmicas na mecânica quântica constitui uma vasta área da física teórica (BARUT, 1972) (WULFMAN, 2011). O problema considerado nesta monografia trata de apenas um exemplo – o mais notório, o potencial de Coulomb – da utilização de representações unitárias de grupos de Lie para a construção dos espaços de Hilbert de problemas de mecânica quântica independentes do tempo.

Outros casos relevantes destes métodos algébricos podem ser encontrados, por exemplo, na chamada mecânica conforme e na descrição de um conjunto de osciladores quânticos. A mecânica conforme em uma dimensão é descrita por um potencial $V(x) = g/x^2$, e se mapeia na representação do grupo $O(2,1)$ (ALFARO; FUBINI; FURLAN, 1976) (GONERA, 2013). Já o espectro de um conjunto de n osciladores quânticos se relaciona com o grupo dinâmico $U(n)$.

Vários outros exemplos existem, mas que não se relacionam com teorias físicas particularmente importantes. Na verdade, em geral, construções similares à desenvolvida nesta monografia são possíveis para todos os grupos de Lie classificados por Cartan (BARUT, 1972), ou seja: a construção de espaços de Hilbert – a determinação de um conjunto completo de operadores que comutam, seus autoestados e respectivas funções de onda – é efetivamente equivalente à construção do espaço de representações unitárias de grupos de Lie.

Os métodos algébricos que resultam desta correspondência entre a teoria de representações e a mecânica quântica proporcionam uma ferramenta poderosa de resolução de problemas –, mas não só isso. Mais do que isto, proporcionam o entendimento de aspectos físicos fundamentais. No caso do potencial de Coulomb, a existência do grupo de simetria $SO(4)$, devido ao fato que o vetor momento angular é ortogonal ao vetor de Laplace-Runge-Lenz, maior que o grupo $SO(3)$ associado apenas às rotações espaciais, que explica a degenerescência dos valores medidos em laboratório para a energia do átomo de hidrogênio. Por fim, a própria existência da relação entre representações de grupos e espaços de Hilbert, por si só, revela uma faceta diferente da estrutura da mecânica quântica, um aspecto profundo da sua natureza teórica – e, portanto, da natureza real do universo em que vivemos.

Referências

ALFARO, V. D.; FUBINI, S.; FURLAN, G. Conformal invariance in quantum mechanics. *Il Nuovo Cimento A*, Springer, v. 34, n. 4, p. 569–612, 1976. Citado na página 39.

ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; HARRIS, F. E. *Mathematical Methods for Physicists*. [S.l.]: Academic Press, 2010. Citado na página 15.

BANDER, M.; ITZYKSON, C. Group theory and the hydrogen atom(i). *Reviews of Modern Physics*, v. 38, n. 2, p. 330–345, 1966. Citado na página 38.

BARUT, A. O. Dynamical groups and generalized symmetries in quantum theory. University of Canterbury Pub, 1972. Citado na página 39.

COHEN-TANNOUDJII, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. New York, NY, USA: Wiley, 1977. Citado na página 13.

DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. [S.l.]: Oxford university press, 1981. Citado na página 18.

FRAMPTON, P. H.; KEPHART, T. W.; ROHM, R. M. A Note on Embedding non-Abelian Finite Flavor Groups in Continuous Groups. *Physics Letters B*, v. 679, p. 478–481, set. 2009. Citado na página 26.

GONERA, J. Conformal Mechanics. *Annals of Physics*, v. 335, p. 61–77, ago. 2013. Citado na página 39.

HAMERMESH, M. *Group Theory and Its Application to Physical Problems*. [S.l.]: Dover Publications, Inc., 1989. Citado na página 19.

LANDAU, L. D. et al. *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics*. [S.l.]: Butterworth Heinemann, 1958. Citado na página 37.

LEMOS, N. A. *Mecânica Analítica*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 11, 28 e 30.

SCHIFF, L. I. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1947. Citado na página 37.

WULFMAN, C. *Dynamical Symmetry*. [S.l.]: World Scientific, 2011. Citado na página 39.

Apêndices

APÊNDICE A – O vetor de Laplace-Runge-Lenz

Na mecânica clássica, uma força cuja magnitude depende somente da distância r da partícula à origem, e é dirigida ao longo do vetor que caracteriza essa distância, é denominada força central, e pode ser representada como

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = F(r)\frac{\mathbf{r}}{r} = F(r)\hat{\mathbf{r}}, \tag{A.1}$$

onde $r = |\hat{\mathbf{r}}|$. Devido à essa particularidade, pode-se obter algumas propriedades bastante interessantes. Primeiro, como torque $\boldsymbol{\tau}$ de uma força central relativo ao centro de força, escolhido como origem, é nulo,

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{0}, \tag{A.2}$$

também o torque pode ser representado como

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}. \tag{A.3}$$

Por definição, o momento angular da partícula é

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \tag{A.4}$$

com $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$. Conclui-se que $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$, portanto o momento angular de uma partícula numa força central é uma constante de movimento.

Uma força central é conservativa, e pode-se expressá-la em termos da energia potencial $V(r)$,

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(r). \tag{A.5}$$

Uma força central que varia em intensidade com o inverso do quadrado da distância, pode ser escrita como

$$\mathbf{F} = \frac{\kappa}{r^2}\hat{\mathbf{r}}, \tag{A.6}$$

onde κ é uma constante. Sendo a força ($\kappa > 0$) atrativa ou ($\kappa < 0$) repulsiva. A energia potencial correspondente é

$$V(r) = \frac{\kappa}{r}. \tag{A.7}$$

Chama-se problema de Kepler o problema de dois corpos que se atraem mutualmente. Para (A.7), pode-se representar a energia potencial para o problema de Kepler, com ($\kappa > 0$) como

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r}. \tag{A.8}$$

A segunda lei de Newton para problemas de força central pode ser escrita vetorialmente a partir de (A.1) como

$$\dot{\mathbf{p}} = F(r)\frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{A.9}$$

e o produto vetorial de $\dot{\mathbf{p}}$ com o vetor momento angular pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} &= \frac{mF(r)}{r}[\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}})] \\ &= \frac{mF(r)}{r}[\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{r}}) - r^2\hat{\mathbf{r}}],\end{aligned} \tag{A.10}$$

entretanto, pode-se reescrever (A.10) notando que

$$r\dot{r} = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}}. \tag{A.11}$$

Como $\mathbf{L}$ é uma constante, pode-se escrever (A.10) como

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = -mF(r)r^2\frac{d}{dt}\Big(\frac{\mathbf{r}}{r}\Big). \tag{A.12}$$

Para o potencial de Kepler, a substituição de (A.8) em (A.12) torna-se

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = \frac{d}{dt}\Big(\frac{mk\mathbf{r}}{r}\Big), \tag{A.13}$$

e pode-se ver facilmente a existência de outro vetor conservado $\mathbf{A}$ definido por

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L}}{m} - \frac{\kappa}{r}\mathbf{r}. \tag{A.14}$$

O vetor $\mathbf{A}$ é conhecido entre os físicos como vetor de Laplace-Runge-Lenz.

APÊNDICE B – Relações de comutação

B.1 Definições

1. $\hbar = 1$.

2. Operador momento angular: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, onde $\mathbf{p} = -\imath\nabla$.

3. $\mathbf{r}$ e $\mathbf{p}$ são operadores vetoriais, e o produto de quaisquer dois operadores vetoriais é um operador vetorial.

4.

$$[x_i, x_j] = 0, \qquad [p_i, p_j] = 0, \qquad [p_i, x_j], = -\imath\delta_{ij}. \tag{B.1}$$

$$[L_i, x_j] = \epsilon_{iab}[x_a p_b, x_j] = \epsilon_{iab} x_a [p_b, x_j] = \epsilon_{iab} x_a (-\imath)\delta_{bj} = \epsilon_{aij} x_a. \tag{B.2}$$

5. Quaisquer três operadores vetoriais satisfazem,

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}. \tag{B.3}$$

   Prova.

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = A_i(\epsilon_{ijk} B_j C_k) = (\epsilon_{kij} A_i B_j) C_k = (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}.$$

6. Qualquer operador vetorial $\mathbf{A}$ satisfaz,

$$\mathbf{A} \times \mathbf{L} = -\mathbf{L} \times \mathbf{A} + 2\imath\mathbf{A}. \tag{B.4}$$

   Prova.

$$\begin{aligned}
(\mathbf{A} \times \mathbf{L})_i &= \epsilon_{ijk} A_j L_k = \epsilon_{ijk}(L_k A_j + [A_j, L_k]) \\
&= \epsilon_{ijk} L_k A_j + \imath\epsilon_{ijk}\epsilon_{qjk} A_q \\
&= \epsilon_{ijk} L_k A_j + \imath(2\delta_{iq}) A_q \\
&= -\epsilon_{ikj} L_k A_j + 2\imath A_i.
\end{aligned}$$

   Note que $\mathbf{L} \times \mathbf{L} = \imath\mathbf{L}$.

7.

$$\mathbf{r}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{r} = 0, \tag{B.5}$$

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{p} = 0. \tag{B.6}$$

Prova. Usando a eq. (B.3) e o fato de que $\mathbf{r}\times\mathbf{r} = \mathbf{0}$ e $\mathbf{p}\times\mathbf{p} = \mathbf{0}$,

$$\mathbf{r}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{r}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p}) = (\mathbf{r}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p} = 0 = \mathbf{L}\cdot\mathbf{r},$$

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{p} = (\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{p} = \mathbf{r}\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{p}) = 0 = \mathbf{p}\cdot\mathbf{L}.$$

8. O operador de Laplace-Runge-Lenz,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}\times\mathbf{L} - \mathbf{L}\times\mathbf{p}) - \kappa\frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{B.7}$$

é um operador vetorial.

9. Hamiltoniana do átomo de Hidrogênio,

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{r}. \tag{B.8}$$

B.2 Álgebra

Partindo das definições dadas na seção B.1, pode-se determinar a álgebra para o problema do átomo de Hidrogênio.

1. Ortogonalidade ente **A** e **L**.

   Considere:

$$\mathbf{L}\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{L}) = \mathbf{L}\cdot(-\mathbf{L}\times\mathbf{p} + 2\imath\mathbf{p}) = 0,$$

$$\mathbf{L}\cdot\frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{1}{r}(\mathbf{L}\cdot\mathbf{r}) + \mathbf{r}\cdot(\mathbf{L}\frac{1}{r}) + \frac{1}{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{L}) = 0,$$

$$(\mathbf{p}\times\mathbf{L})\cdot\mathbf{L} = \mathbf{p}\cdot(\mathbf{L}\times\mathbf{L}) = \imath\hbar\mathbf{p}\cdot\mathbf{L} = 0,$$

$$\frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{L} = \frac{1}{r}\mathbf{r}\cdot\mathbf{L} = 0.$$

   Pode-se ver facilmente que $\mathbf{A}\cdot\mathbf{L} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{A} = 0$.

2. O operador A^2.

   O operador A^2 consiste de 9 termos, 4 dos quais são dados abaixo.
   Considere:

$$(\mathbf{p}\times\mathbf{L})\cdot\mathbf{p} = \mathbf{p}\cdot(\mathbf{L}\times\mathbf{p}) = \mathbf{p}\cdot(-\mathbf{p}\times\mathbf{L} + 2\imath\mathbf{p}) = 2\imath p^2,$$

$$\frac{1}{r}\mathbf{r}\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{L}) = \frac{L^2}{r},$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{p}\times\mathbf{L})\cdot(\mathbf{p}\times\mathbf{L}) &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{abk}p_iL_jp_aL_b = p_iL_jp_iL_j - p_iL_jp_jL_i \\ &= p_i(p_iL_j - \imath\epsilon_{ijk}p_k)L_j - p_i(\mathbf{L}\cdot\mathbf{p})L_i \\ &= p^2L^2 + \imath(\mathbf{p}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{L} = p^2L^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{p}\times\mathbf{L})\cdot\mathbf{r}\frac{1}{r} &= (-\mathbf{L}\times\mathbf{p} + 2\imath\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}\frac{1}{r} = \frac{L^2}{r} + 2\imath\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\frac{1}{r} \\ &= \frac{L^2}{r} + \nabla\cdot\mathbf{r}\frac{1}{r} = \frac{L^2}{r} + 2(3+\mathbf{r}\cdot\nabla)\frac{1}{r} \\ &= \frac{L^2}{r} + 2(\frac{2}{r} + \frac{\imath}{r}\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}) = \frac{L^2}{r} + \frac{4}{r} + \frac{2\imath}{r}\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}.\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^2 &= \left(\frac{1}{m}(\mathbf{p}\times\mathbf{L} - \imath\mathbf{p}) - \kappa\frac{\mathbf{r}}{r}\right)\cdot\left((\frac{1}{m}(\mathbf{p}\times\mathbf{L} - \imath\mathbf{p}) - \kappa\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \\ &= \frac{1}{m^2}p^2L^2 + \frac{p^2}{m^2} - \frac{2\kappa}{mr} + \kappa^2 \\ &= \frac{2}{m}\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{r}\right)(L^2+1) + \kappa^2 \\ &= \frac{2}{m}H(L^2+1) + \kappa^2.\end{aligned}$$

3. Comutador de $\mathbf{A}$ com $\mathbf{L}$.

$$\begin{aligned}[L_i, A_j] &= \left[L_i, \frac{1}{2\mu}(\epsilon_{jkl}p_kL_l - \imath p_j) - \kappa\frac{x_j}{r}\right] \\ &= \frac{\epsilon_{jkl}}{2m}[L_i, p_kL_l] - \frac{\imath}{2m}[L_i, p_j] - \kappa\left[L_i, \frac{x_j}{r}\right] \\ &= \imath\left(\frac{1}{2m}(\epsilon_{kab}p_aL_b - \imath p_k) - \kappa\frac{x_k}{r}\right) \\ &= \imath\epsilon_{ijk}A_k.\end{aligned}$$

4. H e $\mathbf{A}$ comutam.

Considere a identidade:

$$\begin{aligned}\epsilon_{ijk}L_j\left(\imath\frac{\kappa x_k}{r^3}\right) &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{jlm}x_lp_m\left(\imath\frac{\kappa x_k}{r^3}\right) \\ &= (\delta_{jl}\delta_{im} - \delta_{jm}\delta_{il})x_lp_m\left(\imath\frac{\kappa x_j}{r^3}\right) \\ &= \imath\kappa p_l\left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_ix_l}{r^3}\right).\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
[H, A_i] &= \left[\frac{p_l p_l}{2m} - \frac{\kappa}{r}, \frac{1}{m}(-\epsilon_{ijk}L_j p_k - \imath p_i) - \kappa\frac{x_i}{r},\right] \\
&= \frac{\kappa}{m}\epsilon_{ijk}L_j\left[\frac{1}{r}, p_k\right] + \frac{\imath\kappa}{m}\left[\frac{1}{r}, p_i\right] - \frac{\kappa}{2\mu}\left[p_l p_l, \frac{x_i}{r}\right] \\
&= -\imath\frac{\kappa}{m}p_l\left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i x_l}{r^3}\right) + \frac{\kappa}{m}\frac{x_i}{r^3} + \imath\frac{\kappa}{2m}\left\{\left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i r_l}{r^3}\right)p_l + p_l\left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i x_l}{r^3}\right)\right\} \\
&= \frac{\kappa}{m}\frac{x_i}{r^3} - \imath\frac{\kappa}{2m}\left[p_l, \frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i x_l}{r^3}\right] \\
&= \frac{\kappa}{m}\frac{x_i}{r^3} - \frac{\kappa}{2\mu}\frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i x_l}{r^3}\right) \\
&= -\frac{\kappa}{m}\frac{x_i}{r^3} + \frac{\kappa}{m}\frac{x_i}{r^3} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

5. Comutador de **A** com ele mesmo.

Considere:

$$[(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, p_j] = \imath(p_i p_j - \delta_{ij}p^2). \tag{B.9}$$

Prova.

$$\begin{aligned}
[(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, p_j] &= \epsilon_{abi}[L_a p_b, p_j] = \epsilon_{abi}[L_a, p_j]p_b \\
&= \imath\epsilon_{abi}\epsilon_{ajk}p_k p_b = \imath(p_i p_j - \delta_{ij}p_k p_k).
\end{aligned}$$

Note que isso implica que $[(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, p_j]$ é simétrico em i e j. E percebe-se facilmente que

$$\frac{1}{4m^2}[(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})_j] = \frac{1}{m^2}[(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, (\mathbf{L} \times \mathbf{p})_j].$$

Considere:

$$[(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, (\mathbf{L} \times \mathbf{p})_j] = -\imath\epsilon_{ijk}p^2 L_k. \tag{B.10}$$

Prova.

$$\begin{aligned}
[A_i, (\mathbf{L} \times \mathbf{p})_i] &= \epsilon_{abj}[A_i, L_a p_b] = \epsilon_{abj}L_a[A_i, p_b] + \epsilon_{abj}[A_i, L_a]p_b \\
&= \imath\epsilon_{abj}L_a(p_i p_b - \delta_{ib}p^2) - \imath\epsilon_{abj}\epsilon_{aik}A_k p_b \\
&= \imath(\mathbf{L} \times \mathbf{p})_j p_i - \imath\epsilon_{aij}p^2 L_a - \imath A_j p_i = -\imath\epsilon_{aij}p^2 L_a.
\end{aligned}$$

As duas equações acima satisfazem

$$\frac{1}{4m^2}[(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})_i, (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})_j] = -\frac{2\imath\epsilon_{ijk}}{m}\frac{p^2}{2m}L_k.$$

Para reduzir os dois últimos termos de $[A_i, A_j]$, introduz-se a seguinte notação

$$\begin{aligned}D_{ij} &\equiv \frac{1}{2m^2}\left[(\mathbf{p}\times\mathbf{L}-\mathbf{L}\times\mathbf{p})_i, -\frac{x_j}{r}\right]+\frac{1}{2m^2}\left[-\frac{x_i}{r}, (\mathbf{p}\times\mathbf{L}-\mathbf{L}\times\mathbf{p})_j\right]\\ &= \frac{1}{m^2}\left[(\mathbf{L}\times\mathbf{p})_i, \frac{x_j}{r}\right]+\frac{1}{m^2}\left[\frac{x_i}{r}, (\mathbf{L}\times\mathbf{p})_j\right].\end{aligned}$$

Considere:

$$(\mathbf{L}\times\mathbf{r})_i x_j - (\mathbf{L}\times\mathbf{r})_j x_i = r^2(p_i x_j - p_j x_i).$$

Prova.

$$\begin{aligned}\epsilon_{ijk}(\mathbf{L}\times\mathbf{r})_i x_j &= r^2\epsilon_{ijk}p_i x_j\\ (\delta_{i'i}\delta_{j'j}-\delta_{i'j}\delta_{j'i})(\mathbf{L}\times\mathbf{r})_i x_j &= (\delta_{i'i}\delta_{j'j}-r^2\delta_{i'j}\delta_{j'i})p_i x_j.\end{aligned}$$

Considere:

$$D_{ij} = \frac{2\imath\epsilon_{ijk}}{m}\frac{\kappa}{r}L_k.$$

Prova.

$$\begin{aligned}[(\mathbf{L}\times\mathbf{p})_i, \frac{x_j}{r}] &= \epsilon_{abi}\left(L_a\left[p_b, \frac{x_j}{r}\right]+\left[L_a, \frac{x_j}{r}\right]p_b\right)\\ &= \epsilon_{abi}L_a\frac{\imath(x_b x_j - r^2\delta_{bj})}{r^3}+\imath\epsilon_{abi}\epsilon_{ajk}\frac{x_k}{r}p_b\\ &= \frac{\imath}{r^3}(\mathbf{L}\times\mathbf{r})_i x_j - \imath\epsilon_{aji}\frac{L_a}{r}+\imath\delta_{bj}\delta_{ik}\frac{x_k}{r}p_b\\ &= \frac{\imath}{r^3}(\mathbf{L}\times\mathbf{r})_i x_j + \imath\epsilon_{ijk}\frac{L_k}{r}+\imath\frac{x_i}{r}p_b.\end{aligned}$$

E percebe-se que,

$$[A_i, A_j] = -\frac{2\imath H}{m}\epsilon_{ijk}L_k.$$