

§ Simetrias Dinâmicas

Encontramos que existe uma ligação estreita entre simetrias e degenerescência. Uma degenerescência que não está apenas associada a uma simetria geométrica, mas também a forma particular do potencial é chamada de dinâmica.

Vamos a considerar como exemplos (importantes) o problema de Kepler (átomo de hidrogênio) e o problema do oscilador espacial isotrópico.

O problema de Kepler clássico.

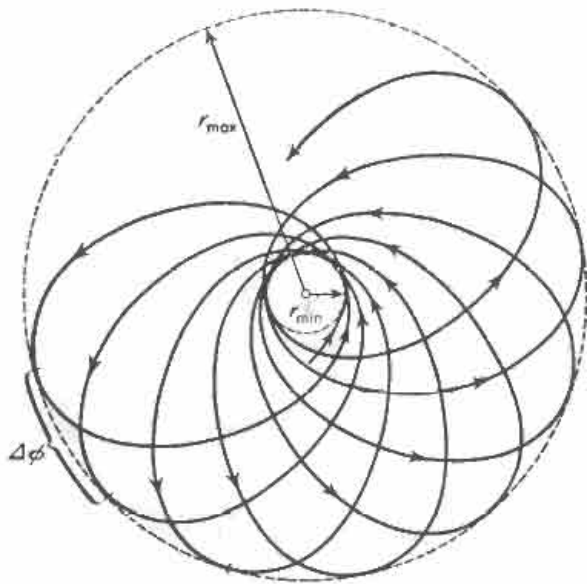
O Hamiltoniano, escrito em coordenadas relativas, é dado por

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{k}{r},$$

com μ sendo a massa reduzida e $k > 0$, $k = Ze^2$, de maneira que o potencial central é atrativo. Os estados ligados (confinados a regiões finitas do espaço) têm energia negativa e as órbitas são elipses (fechadas) com o centro de força em um dos focos. Seja a o semi-eixo maior da elipse. A excentricidade da elipse é dada por

$$0 \leq e = \frac{(a^2 - b^2)^{1/2}}{a} \leq 1,$$

onde b é o semi-eixo menor. Como caso particular, $a = b \Rightarrow e = 0$, e a órbita é um círculo com centro no centro de forças.



Leis de conservação :

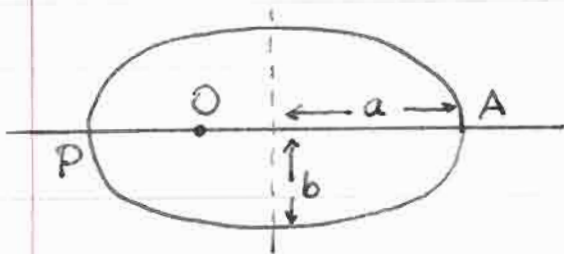
2

1. O Hamiltoniano independe do tempo, portanto ele é conservado (conservação da energia);
2. O campo de forças tem simetria central. Isto implica em conservação do momentum angular \vec{L} . Neste caso, a órbita é planar;
3. A simetria central não implica necessariamente que a órbita seja fechada. Pequenos desvios do potencial de Kepler fazem precessar a elipse. Isto sugere que existe uma lei de conservação extra que deixa fixa a orientação dos eixos (maior) da elipse.

$$E = -\frac{k}{2a}, \quad \vec{L}^2 = \mu k a (1 - e^2)$$

A grandeza extra \vec{M} conservada é conhecida como vetor de Runge-Lenz:

$$\vec{M} = \frac{\vec{p} \times \vec{L}}{\mu} - \frac{k}{r} \vec{r}$$

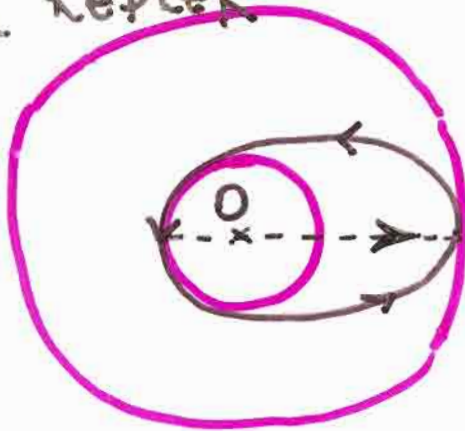


\vec{M} é uma constante do movimento, sua magnitude é ke , e está na direção \vec{OP} .

Tentemos mostrar rapidamente estes resultados:

SIMETRIAS DINÂMICAS NA MECÂNICA CLÁSSICA

I KEPLER



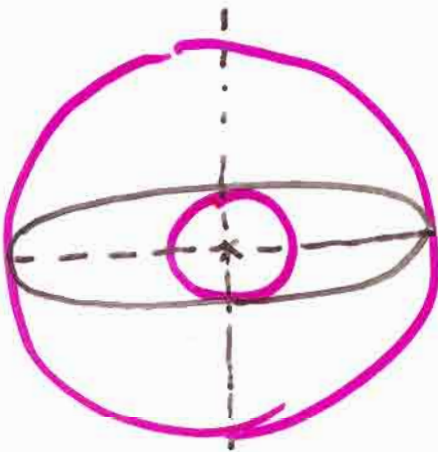
$$U(r) = -\frac{k}{r}$$

$$\vec{R} = \vec{v} \times \vec{l} - k \frac{\vec{r}}{r}$$

VECTOR DE RUNGE-LENZ

o GRUPO DE SIMETRIA É $O(4)$ E NÃO $O(3)$!

II OSCILADOR ESPACIAL



$$U(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

$$\vec{Q} = \frac{1}{m} \vec{p} \otimes \vec{p} + m \omega^2 \vec{r} \otimes \vec{r}$$

MOMENTO DE QUADRUPOLO

o GRUPO COMPLETO É $SU(3)$ E NÃO $O(3)$

$$\vec{M} = \vec{v} \times \vec{L} - \frac{k}{r} \vec{r}$$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \mu [\dot{\vec{v}} \times (\vec{r} \times \vec{v})] - \frac{k}{r} \dot{\vec{v}} + k\dot{r} \left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{r^3} \right)$$

Vejam os o produto duplo:

$$\dot{\vec{v}} \times (\vec{r} \times \vec{v}) = (\dot{\vec{v}} \cdot \vec{v}) \vec{r} - (\dot{\vec{v}} \cdot \vec{r}) \vec{v}$$

usamos a equação de movimento:

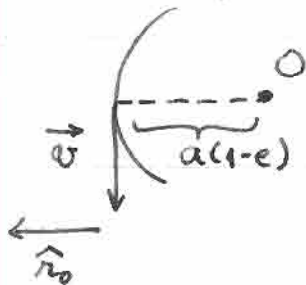
$$\mu \dot{\vec{v}} = - \frac{k}{r^3} \vec{r}$$

$$\Rightarrow \mu [\dot{\vec{v}} \times (\vec{r} \times \vec{v})] = - \frac{k}{r^3} (\vec{v} \cdot \vec{r}) \vec{r} + \frac{k}{r^3} r^2 \dot{\vec{v}},$$

portanto:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = 0 \Rightarrow \vec{M} = \text{cte.}$$

Como é constante, para ter sua direção basta avaliar em um ponto da órbita: usar o periélio



$$\begin{aligned} M_0 &= \vec{v} \times \mu v a(1-e) \hat{z} - k \hat{r}_0 \\ &= [\mu v^2 a(1-e) - k] \hat{r}_0 \end{aligned}$$

Portanto \vec{M} aponta na direção do periélio.
O módulo pode ser escrito como:

$$M_0 = \frac{L^2}{\mu a(1-e)} - k = \frac{\mu k a(1-e^2)}{\mu a(1-e)} - k =$$

$$= k(1+e) - k = ke,$$

ou

$$\vec{M} = ke \hat{r}_0$$

§ Outras propriedades:

A) o vetor \vec{M} está no plano da órbita. Portanto

$$\vec{L} \cdot \vec{M} = 0$$

B) Calculamos M^2 :

$$\vec{M}^2 = (\vec{v} \times \vec{L}) \cdot (\vec{v} \times \vec{L}) + k^2 - 2 \frac{k}{r} [\vec{r} \cdot (\vec{v} \times \vec{L})]$$

temos:

$$(\vec{v} \times \vec{L}) \cdot (\vec{v} \times \vec{L}) = \vec{L} \cdot [(\vec{v} \times \vec{L}) \times \vec{v}]$$

$$\begin{aligned} (\vec{v} \times \vec{L}) \times \vec{v} &= -\vec{v} \times (\vec{v} \times \vec{L}) = -\vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{L}) + \vec{L}v^2 \\ &= \vec{L}v^2, \quad \text{porque } \vec{v} \cdot \vec{L} = 0 \end{aligned}$$

$$\vec{r} \cdot (\vec{v} \times \vec{L}) = \vec{L} \cdot (\vec{r} \times \vec{v}) = \frac{L^2}{\mu},$$

temos:

$$\vec{M}^2 = \vec{L}^2 v^2 - \frac{2}{\mu} \left(\frac{k}{r} \right) \vec{L}^2 + k^2$$

ou :

$$\vec{M}^2 = \frac{2}{\mu} \left(\frac{1}{2} \mu \vec{v}^2 - \frac{k}{r} \right) \vec{L}^2 + k^2$$

$$\vec{M}^2 = \frac{2}{\mu} \mathcal{H} \vec{L}^2 + k^2$$

§ O problema quântico : o átomo de hidrogênio

Sabemos representar os operadores $(\vec{r}, \vec{p}, \vec{L})$.

Versão quântica de \vec{M} : ? Ele tem que ser convenientemente simetrizado :

$$\vec{M} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{k}{r} \vec{r}$$

Os análogos quânticos das fórmulas encontradas acima são :

i) Lei de conservação : $[\vec{M}, \mathcal{H}] = 0$

ii) \vec{M} e \vec{L} são "perpendiculares" :

$$\vec{M} \cdot \vec{L} = \vec{L} \cdot \vec{M} = 0$$

iii) $\vec{M}^2 = \frac{2}{\mu} \mathcal{H} (\vec{L}^2 + \hbar^2) + k^2$

iv) Relações de comutação entre os operadores \vec{L} e \vec{M} :

a) já conhecemos as relações para \vec{L}

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \quad ; \quad i, j, k = x, y, z$$

b) Temos agora:

$$[M_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} M_k$$

c) Para \vec{M} :

$$[M_i, M_j] = -\frac{2i\hbar}{\mu} H \epsilon_{ijk} L_k \quad ,$$

$i, j, k = x, y, z$

Em geral, esta álgebra não fecha, pela presença de H na última relação. Mas como H independe do tempo, e comuta com \vec{M} e \vec{L} , podemos trabalhar em um subespaço do espaço de Hilbert total, onde a energia assume um particular valor E . Considerando estados ligados

$$E = -|E|$$

Neste caso é conveniente definir os operadores:

$$\vec{M}' \equiv \left(-\frac{\mu}{2E}\right)^{1/2} \vec{M} = \left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2} \vec{M}$$

com os quais as relações de comutação c) ficam

$$c') \quad [M_i', M_j'] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k; \quad i, j, k = x, y, z$$

O grupo de simetria gerado neste caso é isomorfo à $SO(4)$. O grupo ortogonal $O(n)$ tem $\frac{n(n-1)}{2}$ parâmetros contínuos. A condição de ortogonalidade é

$$M \cdot M^T = M^T \cdot M = 1,$$

para matrizes reais. Dai temos $\det(M \cdot M^T) = 1 = (\det M)^2$
ou

$$\det M = \pm 1$$

$SO(n)$ é o subgrupo com $\det M = +1$. $SO(4)$ tem 6 parâmetros contínuos e seis geradores infinitesimais, dados neste caso por \vec{L} e \vec{M}' . A identificação completa com $SO(4)$ pode ser feita mudando a notação. Escreveremos $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$, $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$. Re-escreveremos o momentum angular como

$$\vec{L} = (L_x, L_y, L_z) = (L_{23}, L_{31}, L_{12}),$$

de maneira que temos

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i,$$

$i, j = 1, 2, 3$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Estendemos estas equações introduzindo mais uma componente (x_4, p_4) para a coordenada e o momentum com a convenção:

$$M_x' = L_{14}, \quad M_y' = L_{24}, \quad M_z' = L_{34},$$

mantendo as relações canônicas

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}; \quad i, j = 1, 2, 3, 4$$

Isto reproduz as relações de comutação entre \vec{L} e \vec{M}' , mas não representa a simetria geométrica do átomo de hidrogênio pois a quarta coordenada é fictícia. Por isso que falamos que $SO(4)$ descreve a simetria dinâmica do átomo de hidrogênio. A identificação de $SO(4)$ com o grupo de simetria foi obtida apenas para estados ligados, onde $\mathcal{H} \rightarrow E = -|E|$. Que acontece para estados livres, onde $E > 0$?

O problema dos níveis de energia (e das representações irredutíveis do grupo) é facilmente resolvido definindo os operadores

$$\vec{I} \equiv \frac{1}{2}(\vec{L} + \vec{M}'), \quad \vec{K} \equiv \frac{1}{2}(\vec{L} - \vec{M}')$$

Estes satisfazem as relações:

$$[I_i, I_j] = i\hbar I_k \epsilon_{ijk}, \quad [K_i, K_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} K_k$$

$$[I_i, K_j] = 0, \quad [\vec{I}, \mathcal{H}] = [\vec{K}, \mathcal{H}] = 0$$

Tanto \vec{I} como \vec{K} satisfazem individualmente uma álgebra de momentum angular em 3 dim. Comutam também entre si, e com o Hamiltoniano. Isto implica que $SO(4)$ pode ser considerado como um produto direto de $SO(3) \times SO(3)$:

$$SO(4) = SO(3) \times SO(3)$$

Para $SO(3)$ todas as representações irredutíveis do grupo, e portanto dos níveis de energia, podem ser rotulados através dos autovalores do operador de Casimir do grupo (um operador que comuta com o Hamiltoniano e com todas as componentes do momentum angular).

Para $SO(3)$, este operador é \vec{L}^2 . Para a nossa álgebra, temos dois operadores de Casimir que podem ser diagonalizados simultaneamente. Na sua forma diagonal eles são

$$\vec{I}^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad \vec{K}^2 = k(k+1)\hbar^2$$

com, $j, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$, com autovalores inteiros e semi-inteiros.

$$\vec{I}^2 = \frac{1}{4}(\vec{L} + \vec{M}')^2 \quad \vec{K}^2 = \frac{1}{4}(\vec{L} - \vec{M}')^2$$

$$\vec{I}^2 = \frac{1}{4}(\vec{L}^2 + \vec{M}'^2 + \vec{L} \cdot \vec{M}' + \vec{M}' \cdot \vec{L})$$

$$\vec{K}^2 = \frac{1}{4}(\vec{L}^2 + \vec{M}'^2 - \vec{L} \cdot \vec{M}' - \vec{M}' \cdot \vec{L})$$

Alternativamente, podemos escolher como operadores de Casimir

$$C \equiv \vec{I}^2 + \vec{K}^2 = \frac{1}{2}(\vec{L} + \vec{M}')^2$$

$$C' \equiv \vec{I}^2 - \vec{K}^2 = \frac{1}{2}(\vec{L} \cdot \vec{M}' + \vec{M}' \cdot \vec{L})$$

Mas em nosso caso \vec{L} e \vec{M}' são "perpendiculares". Portanto, estamos tratando a parte de $SO(4)$ com $\vec{I}^2 = \vec{K}^2$, de maneira que os valores possíveis do operador de Casimir C são:

$$C = 2k(k+1)\hbar^2, \text{ com } k = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

Temos

$$C = \frac{1}{2}(\vec{L}^2 + \vec{M}'^2) = \frac{1}{2}\left(\vec{L}^2 - \frac{\mu}{2E} \vec{M}^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\vec{L}^2 - \frac{\mu}{2E} \left[\frac{2}{\mu} \mathcal{H}(\vec{L}^2 + \hbar^2) + k^2 \right])\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(-\frac{\mu}{2E} k^2 - \hbar^2\right) = -\frac{\mu k^2}{4E} - \frac{\hbar^2}{2}$$

$$C + \frac{\hbar^2}{2} = -\frac{\mu k^2}{4E} \Rightarrow E = -\frac{\mu k^2}{4(C + \frac{\hbar^2}{2})}$$

11
é escrevendo para $C = 2i(i+1)\hbar^2$, $i = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

$$E = - \frac{\mu k^2 / \hbar^2}{8i(i+1) + 2}$$

$$= - \frac{\mu k^2}{2\hbar^2} \frac{1}{4i(i+1) + 1}$$

$$4i(i+1) + 1 = 4i^2 + 4i + 1 = (2i+1)^2$$

$$E = - \frac{\mu k^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(2i+1)^2}$$

Para o átomo de hidrogênio, $k = Ze^2$, e introduzindo o chamado "número quântico principal"

$$\begin{cases} n \equiv 2i+1, & i = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ n = 1, 2, 3, \dots, \end{cases}$$

os autovalores da energia tomam a forma

$$E = - \frac{\mu (Ze^2)^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

Os valores de (i, k) podem ser semi-inteiros, porém os autovalores de E devem ser inteiros. Isto realmente

acontece, pois

$$\vec{L} = \vec{I} + \vec{K}$$

e

$$\vec{L}^2 = \vec{I}^2 + \vec{K}^2 + 2\vec{I} \cdot \vec{K} = l(l+1)\hbar^2$$

\vec{L} portanto é soma de dois momentos angulares (que podem tomar valores inteiros e semi-inteiros), onde o intervalo para os autovalores de \vec{L} é

$$i+k = 2i = n-1 \leq l \leq |i-k| = 0,$$

de maneira que obtemos l inteiro e variando sobre o intervalo correto

$$n-1 \leq l \leq 0, \text{ ou } l = 0, 1, \dots, (n-1)$$

A degenerescência de cada nível de energia é dada pela arbitrariedade na escolha de I_z e K_z (dada a simetria de rotação)

$$D_n = (2k+1) \cdot (2i+1) = (2i+1)^2 = n^2.$$

Notamos também que o gerador \vec{M}

$$\vec{M} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{\hbar}{2} \vec{n}$$

se comporta como um vetor polar perante a inversão.

\vec{L} , em contraste, comporta-se como um vetor axial.

Assim, esperamos que estados definidos pelos geradores (\vec{L}, \vec{M}) não tenham paridade definida. Este é o caso no átomo de hidrogênio onde estados com l par ou ímpar podem ser degenerados.