

Método de Operadores em Mecânica Quântica

AUTOR

LUIS CESAR NUNES DOS SANTOS

Orientador:

JEFERSON DE LIMA TOMAZELLI

*Dissertação apresentada à Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Santa
Catarina, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Física.*

UFSC - Florianópolis
dezembro de 2010

Método de Operadores em Mecânica Quântica

Luis Cesar Nunes dos Santos

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de **Mestre em Física**, na área de concentração em Física Matemática e Teoria de Campos e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação.

Prof. Dr. Roberto Cid Fernandes Junior
Coordenador do Curso

Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli
(FSC/UFSC-Orientador)

Prof. Dr. Lúcio Campos Costa
(DF/UFMG-Externo)

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz
(FSC/UFSC)

Prof. Dr. José Carlos Brunelli
(FSC/UFSC)

Resumo

Neste trabalho fizemos um estudo sobre métodos de operadores de fatoração em mecânica quântica. Inicialmente, estabelecemos as idéias gerais envolvidas no procedimento de fatoração de Infield e Hull, apontando as vantagens desse método na resolução de equações diferenciais em mecânica quântica não relativística, assim como as dificuldades que se apresentam na resolução da equação de Riccati, que desempenha um papel fundamental nessa abordagem. Derivamos as componentes do operador momento hermitianas em coordenadas esféricas e utilizamos a componente radial para construir operadores escada para o átomo de hidrogênio. Como contraponto ao método de Infield-Hull, desenvolvemos, outra metodologia para a resolução da equação de Schrödinger, intrinsecamente relacionada ao conceito de grupos de simetria; entretanto essa técnica levou a operadores escada compostos por operadores diferenciais lineares de segunda ordem. Por fim, obtivemos operadores escada com dependência linear nas componentes radiais das coordenadas ou no operador momento. A construção de operadores com tal característica foi feita com o auxílio de quantidades conservadas análogas às quantidades clássicas para potenciais coulombianos. Numa primeira situação, os operadores escada obtidos possuíam a característica de dependerem não-linearmente nas coordenadas dos operadores momento e posição, mas, com a ajuda de novos operadores, foi possível encontrar duas fatorações, em que a condição de linearidade fosse satisfeita.

Palavras-chave: EDO's, operadores lineares, equação radial, simetrias, vetor de Pauli-Lenz

Abstract

In this work we studied factorization operator methods in quantum mechanics. Initially, we established the general ideas involved in the Infield-Hull factorization procedure, pointing out the advantages of this method in the resolution of the differential equations in non-relativistic quantum mechanics, as well as the difficulties presented in the resolution of Riccati's equation, which plays a fundamental role in this approach. We derived the hermitian components of the operator momentum in polar spherical coordinates and employed the radial component in order to construct ladder operators for the hydrogen atom. As an alternative to the Infield-Hull factorization, we developed another method of solving Schrödinger equation, strictly related to the concept of symmetry groups; however, this technique lead to ladder operators composed by second-order linear differential operators. Finally, we derived ladder operators linearly dependent on the radial component of coordinates and canonical momentum. The construction of operators with such properties was accomplished by using conserved quantities analogous to the classical ones for Coulomb potentials. In the former situation, the ladder operators exhibited a non-linear dependency on the coordinates and momenta, but, with the aid of new operators, it was possible to find two distinct factorizations where the linearity condition was satisfied.

Key-Words: ODE's, linear operators, radial equation, symmetries, Pauli-Lenz vector.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Jeferson de Lima Tomazelli, pela orientação e amizade.

Aos meus pais, pelo apoio em momentos difíceis.

Aos colegas James, Armando e Jéferson pelas discussões e amizade.

A todos os professores, funcionários e estudantes do departamento.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro.

Conteúdo

Introdução	1
1 Aspectos Básicos dos Operadores de Fatorização	5
1.1 Fatoração do Hamiltoniano em Operadores Lineares	5
1.2 Operadores de Fatorização para a Coordenada Radial do Átomo de Hidrogênio	9
1.3 Quantização de Bohr-Dirac e a fatoração do Hamiltoniano de Coulomb	12
1.4 Operadores Escada em Coordenadas Esféricas	20
1.4.1 O Potencial Coulombiano	21
1.4.2 O Oscilador Isotrópico	22
2 Simetria $so(2, 1)$ e o Tratamento Algébrico	24
2.1 Álgebra do grupo não compacto $SO(2, 1)$	24
2.2 O Potencial Coulombiano	25
2.3 O Oscilador Harmônico Radial	31
3 Operadores de Fatoração Lineares para o Problema de Coulomb	34
3.1 O Operador Vetorial Não-Linear \vec{C}	35

3.2	Fatoração do Operador C_{\pm}^{\pm}	38
3.2.1	Fatoração em operadores lineares em \vec{p}	38
3.2.2	Fatoração em Operadores Lineares em \vec{r}	42
3.2.3	Operadores escada U e V	45
	Conclusões e Perspectivas Futuras	47

Introdução

Na física, quando elaboramos modelos que visam descrever o comportamento de sistemas, frequentemente recaímos em equações cuja incógnita é uma função que aparece sob a forma de derivadas de ordem $1, 2, \dots, N$. Tais tipos de equações são as chamadas equações diferenciais (ED's). Recebem a denominação de equação diferencial parcial (EDP) quando a solução da equação for uma função de várias variáveis ou equação diferencial ordinária (EDO) quando a solução da equação depender explicitamente de apenas uma variável.

Conhecendo as condições iniciais e/ou as condições de contorno do problema físico em questão, poderemos determinar a variação das propriedades estudadas e conseqüentemente fazer previsões que possam ser verificadas experimentalmente. Entretanto, para esse fim, necessitamos, antes de tudo, resolver a equação diferencial correspondente. Neste ponto começam a surgir dificuldades, pois existem muitas ED's que não possuem solução analítica e algumas de difícil solução, por não satisfazerem ao Teorema de Existência e Unicidade, restrito à classe das ED's lineares [1].

Na mecânica quântica, é recorrente usarmos operadores que possuem a propriedade de *fatorar* o operador hamiltoniano. Dessa forma, a tarefa de resolvermos equações diferenciais de segunda ordem é substituída pela de resolvermos duas equações diferenciais de primeira ordem. Métodos de resolução de equações diferenciais por operadores possuem uma rica estrutura matemática que ainda mo-

tiva estudos de interesse puramente matemático, na teoria espectral de operadores lineares [2].

Na formulação hamiltoniana da mecânica quântica, operadores diferenciais de fatoração de primeira ordem podem ser obtidos para um potencial arbitrário, ou seja, dado um potencial específico, do tipo oscilador harmônico ou proporcional a uma potência arbitrária de r , podemos derivar uma equação que forneça os operadores escada (operadores que aumentam ou diminuem o estado quântico de energia ou momento angular); porém, por levarem a equações de difícil solução, não estaremos interessados em explorar métodos usuais de se obter tais operadores, envolvendo relações de recorrência algébricas.

Soluções por método de operadores são introduzidas em cursos de nível elementar em mecânica quântica. Um problema muito didático para ilustrar o método é o oscilador harmônico simples. Neste problema, os livros didáticos definem operadores diferenciais com determinadas propriedades algébricas, e mostram as vantagens do método em termos operacionais. No entanto, a estrutura matemática e a aplicação do método são mais amplas. O primeiro tratamento sistemático do problema de fatoração em mecânica quântica não relativística foi desenvolvido nos anos 50, por Infeld e Hull [3]. Mielnik utilizou um método de fatoração modificado para estudar o oscilador harmônico, obtendo uma família de potenciais exatamente solúveis, que são diferentes do potencial do oscilador harmônico, mas que possuem o mesmo espectro [4]. Fernandes, no mesmo ano, aplicou esse método para estudar a parte radial do átomo de hidrogênio, e obter uma família de novas soluções para potenciais radiais que possuem o mesmo espectro [5]. Somado a isso, temos a aplicação da mesma técnica no contexto da mecânica quântica supersimétrica [6].

Em se tratando de mecânica quântica, os operadores correspondentes a observáveis físicos, devem ser hermitianos. Dessa forma, um tema de interesse de nosso trabalho é a procura por operadores diferenciais de fatoração construídos a partir de outros operadores fundamentais, que exibem essa propriedade. Em geral, o operador hamiltoniano é composto por um termo cinético, ao qual podemos associar

um operador diferencial correspondente ao momento, e um termo de potencial, usualmente representado por uma potência específica do operador de posição. A idéia é fatorar o hamiltoniano em operadores escada que dependam de operadores momento e posição com propriedades de hermiticidade e linearidade. O método de fatoração de Infeld e Hull nos leva à equação de Riccati, que é uma equação diferencial não linear de primeira ordem. Além disso, a metodologia presente no trabalho de Infeld e Hull não fatora o operador hamiltoniano original, mas sim um operador hamiltoniano transformado.

Em contrapartida, a variedade de procedimentos de fatoração, levou alguns pesquisadores a estudar as possíveis relações entre as diferentes abordagens. Miller, após um estudo detalhado, concluiu que os diferentes métodos são casos particulares na teoria de representações das álgebras de Lie [7]. De fato, inúmeros estudos foram feitos com a intenção de se obter o espectro correspondente ao operador hamiltoniano dado, através da identificação de operadores que geram álgebras associadas a determinados grupos de simetria. Em nosso trabalho, dedicamos um capítulo para o estudo de uma elegante abordagem em que o espectro é obtido naturalmente, com a construção de operadores que satisfazem relações de comutação típicas da simetria $so(2, 1)$. Tais operadores, são construídos a partir de operadores diferenciais de segunda ordem, diferentemente dos operadores do método de Infeld e Hull, por exemplo, que são de primeira ordem.

Abordagens baseadas em operadores que satisfazem álgebras de outros grupos de simetria são consideradas na presente dissertação. Examinar o papel de quantidades conservadas em mecânica quântica, que surgem de potenciais radiais, também é interesse de nosso trabalho. Na teoria clássica, o potencial coulombiano fornece uma quantidade vetorial conservada, correspondente ao chamado vetor de Laplace-Runge-Lenz. No contexto da mecânica quântica, estudamos quantidades conservadas análogas; no entanto, devemos levar em consideração a não comutatividade das componentes dos operadores de posição e momento na construção dos operadores auxiliares. Assim, no Capítulo 3, construímos operadores escada para o

problema de coulomb utilizando o de vetor de Pauli-Lenz, que é o análogo quântico do vetor de Laplace-Runge-Lenz.

Capítulo 1

Aspectos Básicos dos Operadores de Fatorização

Neste capítulo iremos introduzir classes de operadores diferenciais em Mecânica Quântica com o intuito de fatorizar equações diferenciais de segunda ordem, as quais determinam o comportamento de sistemas físicos. Antes porém daremos um tratamento mais detalhado aos operadores de momento e de fatoração e sua representação em coordenadas esféricas. Como resultado, derivaremos operadores de momento hermitianos para a coordenada radial. Além disso, iremos utilizar estes operadores para fatorar o hamiltoniano.

Iniciaremos com uma breve revisão do método de fatoração utilizado por Infeld e Hull, de forma a obter a chamada equação de Riccati.

1.1 Fatoração do Hamiltoniano em Operadores Lineares

Numa primeira abordagem, partiremos da equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão,

$$\left[-\frac{\hbar}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + v(x)\right]\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.1)$$

Para fins de praticidade, a equação (1.1) pode ser escrita na forma adimensional

$$H\psi(x) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = \epsilon\psi(x), \quad (1.2)$$

onde $v(x)$ denota um potencial que pode apresentar uma singularidade semelhante àquela do átomo de hidrogênio (isto é, um potencial do tipo $\frac{1}{r}$) ou um potencial do tipo oscilador harmônico, não singular, sendo que ambos devem ser funções reais. Naturalmente, a função ψ deve ser de quadro integrável, ou seja, queremos que a integral $\int |\psi|^2 dx$ seja finita.

A idéia do método de fatoração é reduzir uma equação de segunda ordem a um produto de operadores diferenciais, denotados por a e a^\dagger , acrescido de uma constante denotada por ϵ . Evidentemente, a forma dos operadores irá depender do tipo de potencial para o sistema estudado. A equação de Schrödinger pode ser fatorada com o auxílio dos operadores

$$a = \left[\frac{d}{dx} + \beta_p(x)\right], \quad a^\dagger = \left[-\frac{d}{dx} + \beta_p(x)\right]; \quad (1.3)$$

de fato, podemos constatar que produto desses operadores, acrescido de uma constante ϵ , aplicado em uma função dependente de x fornece

$$\begin{aligned} \left[(a^\dagger a) + \epsilon\right] f(x) &= \left\{ \left[-\frac{d}{dx} + \beta_p(x)\right] \left[\frac{d}{dx} + \beta_p(x)\right] + \epsilon \right\} f(x) \\ &= \left\{ -\frac{d^2}{dx^2} - \beta_p'(x) + \beta_p^2(x) + \epsilon + V(x) - V(x) \right\} f(x) \end{aligned} \quad (1.4)$$

e, da última linha, chegamos à conclusão desejada, que $(a^\dagger a) + \epsilon = H$ desde que a equação abaixo seja satisfeita:

$$-\beta_p'(x) + \beta_p^2(x) + \epsilon - V(x) = 0, \quad (1.5)$$

conhecida como equação de Riccati [3], [8], onde o índice p refere-se a uma solução particular da equação de Riccati. Até a década de 80, acreditava-se que o método da fatoração havia sido completamente explorado. Entretanto Mielnik [4] introduziu uma maneira diferente de abordar o problema.

A idéia de Mielnik foi considerar, não uma solução particular da equação de Riccati, mas sim uma solução geral. Como um primeiro exemplo de aplicação do método, consideremos o oscilador harmônico simples. Podemos resolver a equação de Schrödinger para determinar a função de onda para o potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$.

Ao resolvermos diretamente a EDO poderemos recair nos chamados polinômios de Hermite, no entanto, estaremos inicialmente interessados nos resultados obtidos através do método de fatorização de Infeld-Hull. Como resultado, temos os valores $\varepsilon = 1$ e $\beta_p(x) = x$, que solucionam a equação de Riccati para o potencial do oscilador harmônico [3]. Conseqüentemente, podemos escrever a equação relacionando o Hamiltoniano aos operadores escada como

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 = aa^\dagger + 1. \quad (1.6)$$

Com isso, algumas relações de comutação envolvendo os operadores de abaixamento e levantamento, relacionando-os ao operador Hamiltoniano, podem ser derivadas. Inicialmente, calculamos o comutador $[a, a^\dagger]$:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] f(x) &= \left\{ \left[\frac{d}{dx} + x \right] \left[-\frac{d}{dx} + x \right] - \left[-\frac{d}{dx} + x \right] \left[\frac{d}{dx} + x \right] \right\} f(x) \\ &= -\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{d}{dx} x f(x) - x \frac{d f(x)}{dx} + x^2 f(x) + \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \\ &\quad + \frac{d}{dx} x f(x) - x \frac{d}{dx} f(x) - x^2 f(x) = 2f(x), \end{aligned} \quad (1.7)$$

de modo que $[a, a^\dagger] = 2$. Similarmente, os comutadores $[H, a]$ e $[H, a^\dagger]$ são dados por

$$\begin{aligned}
[H, a] f &= (Ha - aH) f = \left\{ (aa^\dagger + 1) a - a (aa^\dagger + 1) \right\} f \\
&= (aa^\dagger a - a a a^\dagger) f \\
&= a(a^\dagger a - a a^\dagger) f = -2a f
\end{aligned} \tag{1.8}$$

e, portanto, $[H, a] = -2a$. De forma análoga, $[H, a^\dagger] = 2a^\dagger$.

Os operadores a e a^\dagger são de fato operadores de abaixamento e levantamento. Utilizando as relações de comutação acima, junto com a equação de autovalor $H\psi_n = \epsilon\psi_n$, teremos

$$\begin{aligned}
Ha^\dagger\psi_n &= (a^\dagger H + 2a^\dagger) \psi_n \\
&= a^\dagger (\epsilon + 2) \psi_n,
\end{aligned}$$

isto é, se ψ_n é um autoestado de H com autovalor ϵ , então $a^\dagger\psi_n$ também é um autoestado de H com autovalor acrescido de 2 unidades. De modo análogo temos:

$$Ha\psi_n = a(\epsilon - 2)\psi_n,$$

ou seja, ψ_n é um autoestado de H com autovalor ϵ , então $a\psi_n$ também é um autoestado de H com autovalor subtraído de 2 unidades.

Assim, podemos observar que a equação de Schrödinger foi fatorada nos operadores a e a^\dagger , com a condição que a equação de Riccati fosse satisfeita. Dessa forma, o problema de resolver a equação de Schrödinger foi substituído pelo de resolver a equação de Riccati. Infelizmente, a equação de Riccati não possui um método geral de resolução; trata-se de uma equação diferencial não linear de segunda ordem. Nos próximos capítulos, introduziremos outra metodologia de fatoração do operador hamiltoniano, sem a necessidade de resolvermos a equação de Riccati.

1.2 Operadores de Fatorização para a Coordenada Radial do Átomo de Hidrogênio

Nesta seção, iremos abrir mão momentaneamente de trabalharmos com fatores adimensionais. Tal abordagem se deve à conveniência de ilustrar a maneira usual de fatorar o hamiltoniano do átomo de hidrogênio em coordenadas esféricas, que transforma a equação de Schrödinger original para a coordenada r em uma equação que possui a mesma forma da equação de Schrödinger unidimensional em coordenadas cartesianas.

Como é bem conhecido, o hamiltoniano para o átomo de hidrogênio pode ser escrito como $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$. Devido à simetria do hamiltoniano, é natural utilizarmos coordenadas esféricas, escrevendo-o na forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (1.9)$$

onde μ é a massa reduzida da partícula e

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right]. \quad (1.10)$$

Nesse sistema de coordenadas, podemos resolver a equação de Schrödinger usando o método de separação de variáveis. Na notação usual, podemos desacoplar a equação de Schrödinger, supondo uma solução do tipo

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y(\theta, \varphi), \quad (1.11)$$

a qual, após sua substituição, fornece

$$\begin{aligned} HR_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) &= ER_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) + R_{nl}(r) \frac{L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi)}{2\mu r^2} \\ &\quad + V(r) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi); \end{aligned} \quad (1.12)$$

multiplicando ambos os lados por $\frac{1}{R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)}$ e isolando o termo que depende apenas da variável radial, obtemos

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R_{nl}(r) = l(l+1) R_{nl}(r), \quad (1.13)$$

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (1.14)$$

Temos agora duas equações diferenciais, uma ordinária para a parte radial e outra parcial para a parte angular.

Podemos simplificar a equação radial com a substituição

$$u(r) \equiv rR(r), \quad (1.15)$$

de forma que

$$\frac{dR}{dr} = \left[\frac{1}{r} \frac{du}{dr} - u \frac{1}{r^2} \right] = \frac{1}{r^2} \left[r \frac{du}{dr} - u \right], \quad (1.16)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{d}{dr} \left[r \frac{du}{dr} - u \right] = \frac{du}{dr} + r \frac{d^2u}{dr^2} - \frac{du}{dr} = r \frac{d^2u}{dr^2}. \quad (1.17)$$

Assim, podemos escrever a equação diferencial para a coordenada radial na forma

$$(1.18)$$

conhecida como equação radial. A forma dessa equação é idêntica à da equação de Schrödinger unidimensional exceto pelo termo $\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}$; se definirmos o chamado potencial efetivo $V_{ef}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)$, teremos portanto uma equação diferencial análoga ao caso unidimensional. Para resolvermos essa equação diferencial podemos usar o método de operadores e assim fatorar o hamiltoniano, descrevendo-o como um produto de dois operadores. Inicialmente, considerando uma partícula livre, teremos $V(r) = 0$ e, conseqüentemente, a última equação pode ser escrita na forma

$$H_l u = E u, \quad (1.19)$$

com H_l dado por

$$H_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (1.20)$$

No caso da partícula livre, podemos então definir os operadores

$$A_l = \frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right), \quad (1.21)$$

$$A_l^\dagger = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right); \quad (1.22)$$

de fato, o operador hamiltoniano é exatamente o produto dos operadores definidos acima, ou seja, $H_l = A_l^\dagger A_l$. Para ver isso basta aplicar o produto $A_l^\dagger A_l$ a uma função teste, dependente de r :

$$\begin{aligned} A_l^\dagger A_l f(r) &= \left[-\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) \frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) \right] f \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{l}{r} \frac{df}{dr} + \frac{lf}{r^2} + \frac{l}{r} \frac{df}{dr} + \frac{l^2 f}{r^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} f. \end{aligned} \quad (1.23)$$

No caso do átomo de hidrogênio, onde $V = -\frac{k}{r}$, é natural supor que os operadores que fatoram o hamiltoniano sejam diferentes. De fato, definindo os operadores $A_l = \frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) - \frac{i\sqrt{2\mu k}}{2l\hbar}$ e $A_l^\dagger = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) + \frac{i\sqrt{2\mu k}}{2l\hbar}$, teremos

$$\begin{aligned} A_l^\dagger A_l f(r) &= \left[-\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) + \frac{i\sqrt{2\mu k}}{2l\hbar} \right] \\ &\quad \cdot \left[\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) - \frac{i\sqrt{2\mu k}}{2l\hbar} \right] f \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) f - \frac{k}{2l} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) f \\
&\quad - \frac{k}{2l} \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) f + \frac{\mu k^2 f}{2l^2 \hbar^2} \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} \frac{l}{r} + \frac{l}{r} \frac{d}{dr} + \frac{l^2}{r^2} \right) f \\
&\quad - \frac{k}{2l} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} + \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) f + \frac{\mu k^2 f}{2l^2 \hbar^2} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} f - \frac{k}{r} + \frac{\mu k^2 f}{2l^2 \hbar^2}, \tag{1.24}
\end{aligned}$$

de modo que $A_l^\dagger A_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{k}{r} + \frac{\mu k^2 f}{2l^2 \hbar^2}$, ou seja, $H_l = A_l^\dagger A_l - \frac{\mu k^2}{2l^2 \hbar^2}$.

Neste ponto, observamos que, após a substituição (1.15), a equação de Schrödinger foi reescrita de forma simplificada e, posteriormente, fatorada. No caso da partícula livre a fatoração é feita somente pelo produto $A_l^\dagger A_l$, enquanto que para um potencial central devemos acrescentar uma constante.

No entanto, pode-se questionar a necessidade da substituição (1.15), antes de fatorar a equação de Schrödinger em operadores de levantamento e abaixamento, uma vez que, sem tal substituição, preservamos o espaço de Hilbert original da teoria. Além disso, podemos estudar o papel das equações de Heisenberg na teoria. Na próxima seção abordaremos tais aspectos sutis e daremos um novo tratamento ao problema de Coulomb e ao oscilador isotrópico.

1.3 Quantização de Bohr-Dirac e a fatoração do Hamiltoniano de Coulomb

Em seções anteriores, tratamos de um ponto de vista puramente técnico a questão de fatorar um dado operador hamiltoniano. Outros aspectos, tais como a discussão de como o sistema de coordenadas em que o hamiltoniano quântico foi escrito antes de ser fatorado, não foi analisado. Tendo em vista que o tratamento

usual do problema parte do hamiltoniano quântico escrito em coordenadas cartesianas, transformando posteriormente os operadores diferenciais para coordenadas esféricas, cabe aventar a possibilidade de se dispensar um tratamento em que o hamiltoniano seja inicialmente escrito em coordenadas esféricas, partindo da teoria clássica formulada nesse sistema.

Um resultado fundamental bem conhecido da Mecânica Quântica é que, na representação de Schrödinger, a derivada total do valor esperado de um operador corresponde ao valor esperado do comutador entre esse operador e o operador hamiltoniano [9], ou seja

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle, \quad (1.25)$$

onde \hbar é a constante de Planck e H é o operador Hamiltoniano. Para fins práticos, A representará um operador correspondente a um observável de posição e/ou momento generalizados, sem dependência temporal explícita. As equações de Hamilton clássicas, podem ser consideradas como o análogo da equação (1.25), dadas por

$$\frac{dq_{ic}}{dt} = \frac{\partial H_c}{\partial p_{ic}}, \quad (1.26)$$

$$\frac{dp_{ic}}{dt} = -\frac{\partial H_c}{\partial q_{ic}}. \quad (1.27)$$

Podemos formular o chamado princípio da correspondência de Bohr , enunciando-o da seguinte forma:

“Se um sistema quântico tem análogo clássico, então no limite $\hbar \rightarrow 0$ os valores esperados de quantidades quânticas tornam-se os correspondentes das quantidades observáveis clássicas”

Uma leitura atenta deste enunciado indica que o mesmo trata de sistemas quânticos que possuem análogo clássico e fornece uma prescrição para obter o limite clássico, sem entretanto fornecer uma regra de quantização livre de ambiguidades com relação ao ordenamento de operadores diferenciais associados aos observáveis físicos. Por essa razão devemos complementar tal princípio com as chamadas *regras de quantização*. Nesta seção determinaremos as componentes do operador momento

em coordenadas esféricas no contexto da formulação hamiltoniana da mecânica quântica originalmente proposta por Dirac, onde (1.25) é decorrência das equações de movimento de Heisenberg para os operadores. A seguir mostraremos que o operador momento será diferente daquele usualmente apresentado na literatura, na situação em que o hamiltoniano quântico é escrito originalmente em coordenadas esféricas de forma análoga ao hamiltoniano clássico, admitindo a validade de (1.26) e (1.27), como equações envolvendo os respectivos operadores.

Iniciaremos nosso tratamento considerando inicialmente o hamiltoniano dado por

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r); \quad (1.28)$$

usando a equação (1.26) podemos escrever a equação (1.28) como

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_r} \\ &= \frac{\partial}{\partial p_r} \left[\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \\ &= \frac{p_r}{\mu}, \end{aligned}$$

ou seja, $p_r = \mu \dot{r}$. Neste ponto, consideramos a equação de Heisenberg para p_r , que indica que devemos calcular o comutador entre H e r . Assumindo que o hamiltoniano em coordenadas esféricas seja dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (1.29)$$

onde μ é a massa reduzida da partícula e

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right], \quad (1.30)$$

podemos fazer a identificação

$$p_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

e assim calcular o comutador na equação de Heisenberg. Aplicando-o a uma função $f(r)$, temos

$$\begin{aligned}
[H, r] f &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r), r \right] f \\
&= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), r \right] f \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) r f + r \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) f \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 f + r^3 \frac{df}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \left(2r \frac{df}{dr} + r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{\mu} \left(\frac{df}{dr} + \frac{f}{r} \right),
\end{aligned}$$

ou seja,

$$[H, r] = -\frac{\hbar^2}{\mu} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right), \quad (1.31)$$

de forma que, da equação de Heisenberg para $\dot{r} = p_r/\mu$, obtemos a componente radial do operador momento linear

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (1.32)$$

O operador p_r tem a propriedade de ser um operador hermitiano, diferentemente do operador momento considerado em [8], por exemplo. Além disso, pode ser mostrado que o operador p_r pode ser usado na fatoração do hamiltoniano em coordenadas esféricas. De fato, mostraremos a seguir que o operador p_r pode ser obtido de uma combinação simétrica do operador gradiente, ou seja,

$$p_r = \frac{\hbar}{2i} \left(\hat{r} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \hat{r} \right); \quad (1.33)$$

para provar a equação (1.33), partimos do operador gradiente em coordenadas esféricas

$$\vec{\nabla} = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (1.34)$$

levando em conta que, nesse sistema, \hat{r} , $\hat{\theta}$ e $\hat{\varphi}$ são ortogonais entre si. O primeiro termo da equação (1.33) é dado por

$$\hat{r} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r}; \quad (1.35)$$

para calcular o segundo termo, teremos que fazer uso de uma função teste $f(r)$, de forma que

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \hat{r} f &= \hat{r} \cdot \hat{r} \frac{\partial f}{\partial r} + f \frac{\hat{\theta} \cdot \partial \hat{r}}{r \partial \theta} + \frac{f \hat{\varphi} \cdot \partial \hat{r}}{r \text{sen} \theta \partial \varphi} \\ &= \frac{\partial f}{\partial r} + 2 \frac{f}{r}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Substituindo as equações (1.35) e (1.36) em (1.33) recuperamos (1.32). Até este ponto, demonstramos que o operador p_r pode ser obtido da equação de Heisenberg e que podemos relacioná-lo a uma combinação escalar simétrica do operador nabla com o vetor unitário \hat{r} . No entanto, pode ser mostrado que esse procedimento pode ser aplicado às demais coordenadas, ou seja, podemos derivar os operadores p_θ e p_φ , das equações de Heisenberg, construindo produtos escalares simétricos. Considerando o hamiltoniano dado em (1.28), podemos reescrever \vec{L}^2 como

$$\vec{L}^2 = p_\varphi^2 + p_\theta^2, \quad (1.37)$$

onde

$$p_\varphi^2 = \frac{-\hbar^2}{\text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (1.38)$$

$$p_\theta^2 = \frac{-\hbar^2}{\text{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (1.39)$$

de forma que esse hamiltoniano possa ser escrito de forma análoga à expressão clássica

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + \frac{p_\theta^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (1.40)$$

Utilizando novamente a equação (1.26) para os respectivos operadores é possível escrever a equação (1.40) como

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial p_\theta} \left[\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + \frac{p_\theta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \\
&= \frac{p_\theta}{\mu r^2};
\end{aligned}$$

substituindo (1.26) e (1.27) na equação de Heisenberg,

$$i\hbar \frac{d\theta}{dt} = [\theta, H],$$

podemos calcular o comutador entre θ e H no segundo membro desta última:

$$\begin{aligned}
[\theta, H] f(\theta, \varphi) &= \theta H f - H \theta f \\
&= \theta \left(\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + \frac{p_\theta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) f \\
&\quad - \left(\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + \frac{p_\theta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \theta f \\
&= \frac{1}{2\mu r^2} \left[\theta \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) f - \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \theta f \right] \\
&= \frac{1}{2\mu r^2} \left\{ \theta \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}\theta \frac{df}{d\theta} \right) - \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{d}{d\theta} \left[\text{sen}\theta \left(f + \theta \frac{df}{d\theta} \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{2\mu r^2} \left[\frac{\theta}{\text{sen}\theta} \left(-\cos\theta \frac{df}{d\theta} + \text{sen}\theta \frac{d^2 f}{d\theta^2} \right) \right] \\
&\quad - \frac{1}{2\mu r^2} \frac{1}{\text{sen}\theta} \left[-\cos\theta f + \text{sen}\theta \frac{df}{d\theta} + \theta \text{sen}\theta \frac{d^2 f}{d\theta^2} - \theta \cos\theta \frac{df}{d\theta} + \text{sen}\theta \frac{df}{d\theta} \right] \\
&= \frac{1}{\mu r^2} \left(\frac{f \cot\theta}{2} - \frac{df}{d\theta} \right),
\end{aligned}$$

isto é,

$$[\theta, H] = \frac{1}{\mu r^2} \left(\frac{\cot\theta}{2} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \quad (1.41)$$

A equação de Heisenberg fica então

$$\begin{aligned}
\frac{d\theta}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\theta, H] \\
&= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{\mu r^2} \left(\frac{\cot\theta}{2} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\
&= \frac{p_\theta}{\mu r^2},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$p_\theta = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\cot \theta}{2} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right),$$

ou ainda,

$$\pi_\theta \equiv \frac{p_\theta}{r} = -\frac{i}{\hbar r} \left(\frac{\cot g\theta}{2} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \quad (1.42)$$

A seguir, mostraremos que o operador π_θ , a exemplo do operador p_r , pode ser obtido de uma combinação simétrica do operador gradiente, a saber

$$\pi_\theta = \frac{\hbar}{2i} \left(\hat{\theta} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\theta} \right). \quad (1.43)$$

Para provarmos que π_θ pode ser expresso de acordo com a equação (1.43), partiremos da equação (1.34). Para o primeiro termo, o produto $\hat{\theta} \cdot \vec{\nabla}$ fornece um único termo não nulo, o termo que contém o produto escalar $\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}$, de forma que

$$\hat{\theta} \cdot \vec{\nabla} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}; \quad (1.44)$$

para o segundo termo, a exemplo do cálculo feito para p_r , devemos calcular o divergente de funções vetoriais

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \hat{\theta} f(\theta, \varphi) &= \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \hat{\theta} f \\ &= f \hat{r} \cdot \frac{d\hat{\theta}}{dr} + \frac{\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}}{r} \frac{df}{d\theta} + f \hat{\theta} \cdot \frac{d\hat{\theta}}{d\theta} + \frac{f \hat{\varphi}}{r \operatorname{sen} \theta} \cdot \frac{d\hat{\theta}}{d\varphi} \\ &\quad + \frac{\hat{\varphi} \cdot \hat{\theta}}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \\ &= \frac{1}{r} \frac{df}{d\theta} + \frac{f}{r} \cot \theta, \end{aligned}$$

de modo que

$$\vec{\nabla} \cdot \hat{\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \cot \theta. \quad (1.45)$$

Substituindo (1.44) e (1.45) em (1.43) teremos

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2i} \left(\hat{\theta} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\theta} \right) &= \frac{\hbar}{2i} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \cot g\theta + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ &= \frac{\hbar}{ir} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot g\theta \right), \end{aligned}$$

que corresponde à equação (1.43). Procedendo de maneira análoga, temos, para a coordenada φ ,

$$\begin{aligned}\frac{d\varphi}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} \\ &= \frac{p_\varphi}{\mu r^2};\end{aligned}$$

devemos calcular o comutador na equação de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = [\varphi, H], \quad (1.46)$$

aplicando à mesma função teste:

$$\begin{aligned}[\varphi, H] f(\theta, \varphi) &= \left[\varphi, \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + \frac{p_\theta^2}{2\mu r^2 \text{sen}\theta} + V(r) \right] f \\ &= \left[\varphi, \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} \right] f \\ &= \frac{1}{2\mu r^2} \left[\varphi \left(\frac{-\hbar^2}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) f - \left(\frac{-\hbar^2}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \varphi f \right] \\ &= \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2 \text{sen}^2\theta} \left[\varphi \frac{d^2 f}{d\varphi^2} - \frac{d}{d\varphi} \left(f + \varphi \frac{df}{d\varphi} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu r^2 \text{sen}^2\theta} \frac{df}{d\varphi},\end{aligned}$$

isto é,

$$[\varphi, H] = \frac{\hbar^2}{\mu r^2 \text{sen}^2\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Com esse resultado, a equação (1.46) fica

$$\begin{aligned}\frac{d\varphi}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\varphi, H] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2}{\mu r^2 \text{sen}^2\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= \frac{p_\varphi}{\mu r^2},\end{aligned}$$

ou,

$$p_\varphi = -\frac{i\hbar}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

ou ainda,

$$\pi_\varphi \equiv \frac{p_\varphi}{r \operatorname{sen}\theta} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (1.47)$$

A exemplo dos operadores π_θ e p_r , o operador π_φ pode ser escrito como uma combinação escalar simétrica envolvendo o operador nabla. Para completar os cálculos que fornecem as propriedades das componentes do operador momento, partimos novamente do operador nabla em coordenadas esféricas, para demonstrarmos que uma combinação simétrica fornecerá exatamente a equação (1.47.) Considerando a equação

$$\pi_\varphi = \frac{\hbar}{2i} \left(\hat{\varphi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\varphi} \right), \quad (1.48)$$

verificamos que seu primeiro membro é dado por

$$\hat{\varphi} \cdot \vec{\nabla} = \frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

enquanto que o segundo membro fornece

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \hat{\varphi} f &= \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \hat{\varphi} f \\ &= \hat{r} \cdot f \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \cdot \hat{\varphi} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{f \hat{\theta}}{r} \cdot \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} + \frac{f \hat{\varphi}}{r \operatorname{sen}\theta} \cdot \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \\ &= \frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi}, \end{aligned}$$

recuperando assim a equação (1.48)

1.4 Operadores Escada em Coordenadas Esféricas

Na seção anterior, consideramos o hamiltoniano de uma partícula sujeita a um potencial central, escrito em coordenadas esféricas, a partir do qual derivamos as componentes do operador momento a partir de princípios fundamentais, de acordo com o método de quantização canônica, preservando a forma funcional do hamiltoniano clássico. Dando prosseguimento a esse procedimento, derivaremos operadores de abaixamento e levantamento, de forma que o hamiltoniano seja fatorado. Além

disso, esses operadores serão escritos em termos da componente radial do operador momento a qual, como vimos antes, é hermitiana no espaço de Hilbert das soluções da equação de Schrödinger radial.

1.4.1 O Potencial Coulombiano

Conforme (1.13), o hamiltoniano referente ao problema de autovalores associado à coordenada radial da partícula é dado por

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R_{nl}(r) = +l(l+1) R_{nl}(r);$$

para o potencial $V(r) = -\frac{k}{r}$, esta equação equivale a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{k}{r} \right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r). \quad (1.49)$$

Definindo os operadores

$$A_l = \frac{1}{\sqrt{2\mu}} \left[p_r - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right], \quad (1.50)$$

$$A_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\mu}} \left[p_r + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right], \quad (1.51)$$

sendo p_r dado por

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right),$$

podemos escrever a equação (1.49) como

$$\left(A_l^\dagger A_l - \frac{k^2 \mu}{2\hbar^2 l^2} \right) R_{nl}(r) = ER_{nl}(r). \quad (1.52)$$

Para verificar a validade da equação (1.52), basta aplicarmos os operadores definidos em (1.50) e (1.51) sucessivamente, a uma função $f(r)$, fornecendo

$$A_l^\dagger A_l f(r) = \frac{1}{2\mu} \left[p_r + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right] \left[p_r - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right] f$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right] \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \frac{k\mu}{\hbar l} \right) \right] f \\
&= \frac{1}{2\mu} \left[-\hbar^2 \left(\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df}{dr} \right) - \hbar \left(\frac{\hbar l}{r} \frac{df}{dr} - \frac{k\mu}{\hbar l} \frac{df}{dr} - \frac{k\mu}{\hbar l r} f \right) \right] \\
&\quad + \frac{1}{2\mu} \left[\hbar \left(\frac{\hbar l}{r} \frac{df}{dr} + \frac{\hbar l f}{r^2} - \frac{k\mu}{\hbar l} \frac{df}{dr} - \frac{k\mu}{\hbar l r} f \right) + \left(\frac{\hbar^2 l^2 f}{r^2} - 2 \frac{\mu k f}{r} + \frac{k^2 \mu^2}{\hbar^2 l^2} \right) \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{df}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} f - \frac{k}{r} f + \frac{k^2 \mu}{2\hbar^2 l^2} f,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$A_l^\dagger A_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{k}{r} + \frac{k^2 \mu}{2\hbar^2 l^2} \equiv H_l + \frac{k^2 \mu}{2\hbar^2 l^2}. \quad (1.53)$$

1.4.2 O Oscilador Isotrópico

No caso do oscilador isotrópico temos $V(r) = kr^2$, de forma que a equação de Schrödinger radial é escrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + kr^2 \right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r); \quad (1.54)$$

a exemplo do problema de Coulomb, podemos definir os operadores

$$A_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\mu}} \left[p_r + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right], \quad (1.55)$$

$$A_l = \frac{1}{\sqrt{2\mu}} \left[p_r - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right], \quad (1.56)$$

novamente, com

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right).$$

Dessa forma, podemos escrever a equação (1.54) em termos dos operadores A_l^\dagger e A_l ,

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + kr^2 \right] R_{nl}(r) &= \left(A_l^\dagger A_l + \hbar l \sqrt{\frac{k}{2\mu}} \right) R_{nl}(r) \\
&= ER_{nl}(r), \quad (1.57)
\end{aligned}$$

ou, equivalentemente,

$$H_l = A_l^\dagger A + \hbar l \sqrt{\frac{k}{2\mu}}.$$

De fato, podemos aplicar o produto $A_l^\dagger A$ a uma função dependente de r , fornecendo o resultado

$$\begin{aligned} A_l^\dagger A f &= \frac{1}{2\mu} \left[p_r + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] \left[p_r - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] f \\ &= \frac{1}{2\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) + i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) - i \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] f \\ &= \frac{1}{2\mu} \left[-\hbar^2 \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) - \hbar \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] f \\ &\quad \frac{1}{2\mu} \left[\hbar \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) + \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \left(\frac{\hbar l}{r} - \sqrt{2\mu k r} \right) \right] f \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{r\mu} \frac{df}{dr} \\ &\quad - \frac{\hbar}{2\mu} \left(\frac{\hbar l}{r} \frac{df}{dr} - \frac{\hbar l f}{r^2} - \sqrt{2\mu k} f - \sqrt{2\mu k r} \frac{df}{dr} + \frac{\hbar l f}{r^2} \right) \\ &\quad + \frac{\hbar}{2\mu} \left(\frac{\hbar l}{r} \frac{df}{dr} + \frac{\hbar l f}{r^2} - \sqrt{2\mu k r} \frac{df}{dr} - \sqrt{2\mu k} f \right) + \\ &\quad + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\hbar^2 l^2 f}{r^2} - 2\hbar l \sqrt{2\mu k} f + 2\mu k r^2 f \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{r\mu} \frac{df}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} f + k r^2 f - \hbar l \sqrt{\frac{k}{2\mu}} f, \end{aligned}$$

de forma que

$$A_l^\dagger A = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{r\mu} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + k r^2 - \hbar l \sqrt{\frac{k}{2\mu}} = H_l - \hbar l \sqrt{\frac{k}{2\mu}}.$$

Capítulo 2

Simetria $so(2, 1)$ e o Tratamento Algébrico

Nesta seção analisaremos o setor radial do potencial de Coulomb e o oscilador isotrópico, baseado na álgebra $SO(2, 1)$ [10],[11] . A idéia é aplicar um tratamento algébrico de forma que o espectro do hamiltoniano, referente ao sistema físico em questão, seja obtido sem a necessidade de se resolver diretamente a equação de Schrödinger. No entanto, como ficará claro a seguir, apesar de tal objetivo ser alcançado, os operadores diferenciais que decompõem a equação de Schrödinger não são todos de primeira ordem. Isso irá nos motivar a procurar mais adiante um tratamento algébrico, que fatore o hamiltoniano em operadores construídos a partir de observáveis físicos.

2.1 Álgebra do grupo não compacto $SO(2, 1)$

A existência de simetrias nas leis que regem o comportamento de sistemas físicos é um indicativo do elegante comportamento que a natureza parece possuir. No entanto, a noção intuitiva de simetria que possuímos pode não ser eficiente para classificarmos sistematicamente as simetrias existentes. Felizmente, pode ser delegada à chamada Teoria de Grupos a tarefa bem sucedida do estudo rigoroso do conceito de simetria de um ponto de vista puramente abstrato.

Historicamente, o conceito de abstrato de Grupo teve origem nos estudos de Evariste Galois (1811-1832) e Niels Henrik Abel (1802-1829) , com o intuito de resolver equações polinomiais [12]. Mas foi em meados do século XX que se começou a perceber a utilidade dos grupos em física. Após um período de desenvolvimento da Mecânica Quântica, entre 1924 e 1928, os estudos de H. Weyl e E. Wigner indicaram que a Teoria de Grupos poderia ser usada como um poderoso instrumento de análise em Mecânica Quântica. Desde então, numerosas aplicações foram feitas na física e em outras ciências [12].

O foco de nosso interesse é a aplicação da Teoria de Grupos em Mecânica Quântica, especificamente em problemas que envolvem potenciais centrais que apresentam simetrias sob rotações. Para o caso do potencial coulombiano o grupo que pode ser associado à sua simetria sob rotações é o grupo $SO(2,1)$ e a sua álgebra associada [13]. A álgebra $so(2,1)$ deve obedecer as seguintes relações de comutação:

$$[L_1, L_2] = iL_3, \tag{2.1}$$

$$[L_2, L_3] = iL_1, \tag{2.2}$$

$$[L_1, L_3] = -iL_2, \tag{2.3}$$

enquanto o chamado operador ou invariante de Casimir [10] dessa álgebra é dado por

$$C = L_3^2 - L_2^2 - L_1^2.$$

2.2 O Potencial Coulombiano

Inicialmente, partiremos da equação de Schrödinger radial obtida anteriormente, dada por

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R_{nl}(r) = l(l+1) R_{nl}(r); \quad (2.4)$$

conforme a substituição proposta, $R = \frac{\psi}{r}$, a equação (2.4) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] \psi = E\psi. \quad (2.5)$$

Para facilitar o tratamento algébrico que segue, escreveremos a equação de Schrödinger em coordenadas atômicas. Nesse sistema de unidades, grandezas físicas fundamentais como massa do elétron, constante de Planck, carga elementar e constante de força eletrostática são normalizadas à unidade, ou seja, $m_e = \hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$. Dessa forma, o potencial coulombiano fica $V(r) = -\frac{Z^2}{r}$; conseqüentemente, os autovalores de energia passam a ser escritos como $E = -\frac{Z^2}{2n^2}$. Ao substituir esses valores de potencial e energia na equação (2.5), teremos como resultado

$$-\frac{d^2\psi}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} + \frac{Z^2}{n^2} \right] \psi = E\psi. \quad (2.6)$$

A equação (2.6) pode ser escrita de uma forma mais compacta. Para isso, podemos fazer a substituição de variável $\rho = \frac{Z}{n}r$, junto com $\psi(r) \rightarrow \psi(\rho)$. Devido a essa definição, devemos calcular as derivadas de ψ em relação a r levando em conta agora que ψ depende de ρ . O resultado dessa derivada é $\frac{d^2\psi(\rho)}{dr^2} = \frac{Z^2}{n^2} \frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2}$, de modo que equação (2.6) se reduz a

$$\left[-\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho} + \rho \right] \psi = 2n\psi, \quad (2.7)$$

escrita de uma forma ideal para o próximo passo, no procedimento de reconhecer a simetria que a equação (2.4) possui.

Com base na equação (2.7), podemos definir dois operadores $w_1 = \rho$ e $w_3 = -\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho}$ e assim reconhecer (2.7) como

$$[w_1 + w_3] \psi = 2n\psi. \quad (2.8)$$

Todavia, estamos interessados nas propriedades dos operadores w_1 e w_3 . A seguir, verificaremos que o comutador $[w_1, w_3]$ fornecerá um operador de grande importância para resolvermos a equação (2.7). Sendo $f(\rho)$ uma função teste, o comutador $[w_1, w_3]$ é dado por

$$\begin{aligned} [w_1, w_3]f &= \rho \left[-\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] f - \left[-\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] \rho f \\ &= -\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + l(l+1)f + \rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{df}{d\rho} + f \right) - l(l+1)f \\ &= 2\rho \frac{df}{d\rho}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

ou seja, $[w_1, w_3] = 2\rho \frac{d}{d\rho}$. Se definirmos $w_2 = -i\rho \frac{d}{d\rho}$, teremos o comutador fundamental

$$[w_1, w_3] = 2iw_2. \quad (2.10)$$

De modo análogo, aplicando o comutador $[w_1, w_2]$ a uma função teste, teremos

$$\begin{aligned} [w_1, w_2]f(\rho) &= \rho \left[-i\rho \frac{d}{d\rho} \right] f - \left[-i\rho \frac{d}{d\rho} \right] \rho f \\ &= -i\rho^2 \frac{df}{d\rho} + i\rho f + -i\rho^2 \frac{df}{d\rho} \\ &= iw_1 f, \end{aligned}$$

ou seja,

$$[w_1, w_2] = iw_1. \quad (2.11)$$

Por fim, o comutador $[w_2, w_3]$ pode ser obtido da mesma forma, o que fornece

$$[w_2, w_3]f = \left(-i\rho \frac{d}{d\rho} \right) \left(-\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho} \right) f - \left(-\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho} \right) \left(-i\rho \frac{d}{d\rho} \right) f$$

$$\begin{aligned}
&= \left(-i\rho \frac{d}{d\rho}\right) \left(-\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2}\right) + \left(-i\rho \frac{d}{d\rho}\right) \left(\frac{l(l+1)f}{\rho}\right) - \left(-\rho \frac{d^2}{d\rho^2}\right) \left(-i\rho \frac{df}{d\rho}\right) \\
&\quad - \left(\frac{l(l+1)}{\rho}\right) \left(-i\rho \frac{df}{d\rho}\right) \\
&= i\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + i\rho^2 \frac{d^3 f}{d\rho^3} - il(l+1) \frac{df}{d\rho} + il(l+1) f \frac{1}{\rho} - \\
&\quad i\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{df}{d\rho} + \rho \frac{d^2 f}{d\rho^2}\right) + il(l+1) \frac{df}{d\rho} \\
&= -i\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + il(l+1) f \frac{1}{\rho} = iw_3 f
\end{aligned}$$

ou seja,

$$[w_2, w_3] = iw_3. \quad (2.12)$$

Com base nos operadores w_1 , w_2 e w_3 , podemos definir 3 novos operadores, os quais satisfazem a álgebra da simetria $so(2, 1)$:

$$T_1 = \frac{1}{2}(w_3 - w_1), \quad (2.13)$$

$$T_2 = w_2, \quad (2.14)$$

$$T_3 = \frac{1}{2}(w_3 + w_1). \quad (2.15)$$

De fato, podemos constatar que os operadores definidos em (2.13), (2.14) e (2.15) satisfazem as relações (2.1), (2.2) e (2.3). Iniciando pelo cálculo do comutador $[T_1, T_2]$, teremos

$$[T_1, T_2] = \frac{1}{2}(w_3 w_2 - w_1 w_2) - \frac{1}{2}(w_2 w_3 - w_2 w_1);$$

Utilizando (2.12) e (2.11) para comutar os termos $w_1 w_2$ e $w_2 w_3$, teremos

$$\begin{aligned}
[T_1, T_2] &= \frac{1}{2}(w_3 w_2 - iw_1 - w_2 w_1) - \frac{1}{2}(w_3 w_2 + iw_3 - w_2 w_1) \\
&= -\frac{1}{2}i(w_1 + w_3) = -iT_3,
\end{aligned}$$

De forma análoga, temos para os operadores T_1 e T_3 ,

$$\begin{aligned} [T_1, T_3] &= \frac{1}{4} (w_3^2 + w_3w_1 - w_1w_3 - w_1^2) - \frac{1}{4} (w_3^2 + w_1w_3 - w_3w_1 - w_1^2) \\ &= \frac{1}{2} (w_3w_1 - w_1w_3), \end{aligned}$$

ou, de (2.10),

$$[T_1, T_3] = -iw_2 = -iT_2. \quad (2.16)$$

A última relação de comutação, $[T_2, T_3]$, é dada por

$$\begin{aligned} [T_2, T_3] &= \frac{1}{2} (w_2w_3 + w_2w_1) - \frac{1}{2} (w_3w_2 + w_1w_2) \\ &= \frac{i}{2} (w_3 + w_1) = iT_1. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Assim, verificamos que as relações de comutação entre T_1 , T_2 e T_3 correspondem à álgebra $so(2, 1)$. Desta forma, a escolha dos operadores T_1 , T_2 e T_3 mostrou-se acertada, permitindo a identificação do grupo de simetria associado à equação (1.1). Neste ponto, é útil examinarmos algumas propriedades dos operadores T_1 , T_2 e T_3 quando aplicados a uma autofunção $\psi_{v,l}$.

Uma vez que pretendemos obter o espectro do hamiltoniano apenas com o uso de operadores, isto é, através de meios algébricos, em que os estados quânticos serão reconhecidos em termos da atuação dos operadores de abaixamento e levantamento, definidos com base nos operadores T_1 , T_2 e T_3 [10], devemos considerar a atuação de T_3 sobre $\psi_{v,l}$. De acordo com a equação (2.15), podemos reescrever a equação (2.8) como

$$T_3\psi_{v,l} = n\psi_{v,l}. \quad (2.18)$$

Assim (2.7) torna-se uma equação de autovalores para T_3 , e esta relaciona-se ao número quântico principal n e, conseqüentemente, à energia do sistema.

Para obtermos o espectro de energia do sistema, definiremos os chamados operadores de transição, dados por

$$T_{\pm} = T_1 \pm iT_2. \quad (2.19)$$

A aplicação do produto $T_3 T_{\pm}$ a $\psi_{v,l}$ fornece

$$T_3 T_{\pm} \psi_{v,l} = T_3 (T_1 \pm iT_2) \psi_{v,l};$$

utilizando as relações de comutação definidas em (2.16) e (2.17) para comutar $T_3 T_1$ e $T_3 T_2$ respectivamente, temos

$$\begin{aligned} T_3 T_{\pm} \psi_{v,l} &= (iT_2 + T_1 T_3) \psi_{v,l} \pm i(-iT_1 + T_2 T_3) \psi_{v,l} \\ &= (iT_2 + T_1 n) \psi_{v,l} \pm i(-iT_1 + T_2 n) \psi_{v,l} \\ &= T_1 (n \pm 1) \psi_{v,l} \pm iT_2 (n \pm 1) \psi_{v,l} \\ &= (n \pm 1) (T_1 \pm iT_2) \psi_{v,l} \\ &= (n \pm 1) T_{\pm} \psi_{v,l}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Assim concluímos que $T_{\pm} \psi_{v,l}$ é autofunção de T_3 e, de acordo com a equação (2.20), a aplicação de T_{\pm} a ψ fornece a autofunção correspondente a um estado com n acrescido ou diminuído de uma unidade, ou seja, $T_{\pm} \psi_{v,l} \propto \psi_{v \pm 1, l}$. Resta agora a determinação da constante de proporcionalidade entre $T_{\pm} \psi_{v,l}$ e $\psi_{v \pm 1, l}$, que pode ser obtida com a ajuda da relação $T_{\pm} T_{\mp}$:

$$\begin{aligned} (T_1 \pm iT_2) (T_1 \mp iT_2) &= \pm i(T_2 T_1 - T_1 T_2) - (T_2^2 - T_1^2 + T_3^2) + T_3^2 \\ &= \pm i(iT_3) - (-T_2^2 - T_1^2 + T_3^2) + T_3^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Os termos entre parênteses constituem justamente o invariante de Casimir da álgebra, cujo autovalor é dado por $C_2 = l(l+1)$ [10]. Antecipando a atuação dos operadores C_2 e T_3 sobre as autofunções, a equação (2.21) torna-se

$$(T_1 \pm iT_2)(T_1 \mp iT_2) = n(n \pm 1) - l(l+1). \quad (2.22)$$

Visando determinar a constante de proporcionalidade entre $T_{\pm}\psi_{v,l}$ e $\psi_{v\pm 1,l}$, devemos impor a normalização das autofunções. Na notação de Dirac, podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle \psi_{v\pm 1,l} | \psi_{v\pm 1,l} \rangle &= |k|^2 \langle \psi_{v,l} | \psi_{v,l} \rangle \\ &= \langle \psi_{v,l} | T_{\pm} T_{\mp} | \psi_{v,l} \rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Por outro lado, de (2.22),

$$\begin{aligned} |k|^2 \langle \psi_{v,l} | \psi_{v,l} \rangle &= \langle \psi_{v,l} | n(n \pm 1) - l(l+1) | \psi_{v,l} \rangle \\ &= [n(n \pm 1) - l(l+1)] \langle \psi_{v,l} | \psi_{v,l} \rangle, \end{aligned} \quad (2.24)$$

isto é,

$$|k|^2 = [n(n \pm 1) - l(l+1)] \quad (2.25)$$

ou, escolhendo a fase sendo igual à unidade, temos finalmente

$$k = \sqrt{n(n \pm 1) - l(l+1)}, \quad (2.26)$$

de forma que

$$T_{\pm}\psi_{v,l} = \sqrt{n(n \pm 1) - l(l+1)}\psi_{v\pm 1,l}.$$

Assim, os operadores T_{\pm} , também chamados de operadores escada, atuam levantando ou abaixando a energia do estado quântico no problema de Coulomb.

2.3 O Oscilador Harmônico Radial

Nessa seção aplicaremos o mesmo método da seção anterior para resolver o oscilador harmônico. Para esse problema, os autovalores de energia e o potencial são, respectivamente, $E = \hbar w (2v + l + 3/2)$ e $V(r) = \frac{1}{2}\mu w^2 r^2$. Dessa forma, a equação de Schrödinger é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2}\mu w^2 r^2 \right] u = \hbar w (2v + l + 3/2) u, \quad (2.27)$$

onde μ é a massa reduzida do sistema, w a frequência angular, l o número quântico de momento angular e v o número quântico vibracional. Fazendo a transformação $\xi = \frac{r}{a}$, onde $a = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu w}}$, a equação (2.27) pode ser escrita como

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left[\frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2 - (2v + l + 3/2) \right] u = 0.$$

Definindo os operadores $w_1 = \frac{1}{2}\xi^2$ e $w_3 = \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right]$, teremos

$$\begin{aligned} [w_1, w_3] f &= \frac{1}{2} \xi^2 \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] f - \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \frac{1}{2} \xi^2 f \\ &= \frac{f}{2} + \xi \frac{df}{d\xi}, \end{aligned}$$

e, portanto,

$$[w_1, w_3] = \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{1}{2}.$$

Definindo $w_2 = \frac{-i}{2} \left(\xi \frac{d}{d\xi} + \frac{1}{2} \right)$, podemos então escrever

$$[w_1, w_3] = 2iw_2. \quad (2.28)$$

Assim, os operadores

$$T_1 = \frac{1}{2} (w_3 - w_1), \quad (2.29)$$

$$T_2 = w_2, \quad (2.30)$$

$$T_3 = \frac{1}{2} (w_3 + w_1), \quad (2.31)$$

satisfazem a álgebra $so(2, 1)$. O autovalor correspondente ao operador de Casimir da álgebra é dado por $C_2 = \frac{1}{4} \left[l(l+1) - \frac{3}{4} \right]$. Uma vez definidos operadores de transição, de acordo com (2.19), podemos calcular a constante de proporcionalidade entre $\psi_{v,l}$ e $\psi_{v\pm 1,l}$. Assim, como na seção anterior,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{v\pm 1,l} | \psi_{v\pm 1,l} \rangle &= |k|^2 \langle \psi_{v,l} | \psi_{v,l} \rangle \\ &= \langle \psi_{v,l} | T_{\pm} T_{\mp} | \psi_{v,l} \rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

A partir do produto

$$T_{\pm} T_{\mp} = (T_1 \pm iT_2)(T_1 \mp iT_2) = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} \pm 1 \right) - C_2,$$

obtemos

$$\begin{aligned} \langle \psi_{v\pm 1,l} | \psi_{v\pm 1,l} \rangle &= |k|^2 \langle \psi_{v,l} | \psi_{v,l} \rangle \\ &= \langle \psi_{v,l} | \left[\frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} \pm 1 \right) - C_2 \right] | \psi_{v,l} \rangle, \end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{aligned} |k|^2 &= \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} \pm 1 \right) - C_2 \\ &= \frac{(2v+l+3/2)}{2} \left(\frac{2v+l+3/2}{2} \pm 1 \right) - \frac{1}{4} \left[l(l+1) - \frac{3}{4} \right], \end{aligned}$$

de modo que

$$T_{\pm} \psi_{v,l} = \sqrt{\frac{(2v+l+3/2)}{2} \left(\frac{2v+l+3/2}{2} \pm 1 \right) - \frac{1}{4} \left[l(l+1) - \frac{3}{4} \right]} \psi_{v\pm 1,l}.$$

Desse modo, demonstramos que os dois potenciais exatamente solúveis correspondem a diferentes realizações da álgebra $so(2, 1)$. Naturalmente, os operadores de transição da álgebra $so(2, 1)$ desempenham o papel de operadores escada para ambos potenciais radiais estudados.

Capítulo 3

Operadores de Fatoração Lineares para o Problema de Coulomb

Neste capítulo daremos prosseguimento ao nosso programa de fatoração. No entanto, a procura por operadores de abaixamento e levantamento para o problema de Coulomb ganhará um novo ingrediente, emprestado do formalismo da Mecânica Clássica.

Classicamente, no problema de forças centrais, especificamente no caso de potenciais do tipo k/r , estamos interessados nas quantidades conservadas que correspondem às integrais de movimento [14]. Entre elas, podemos destacar o vetor de Laplace-Runge-Lenz para uma partícula de massa M , momento angular \vec{L} e momento linear \vec{p} ,

$$\vec{A}_c = (Mk)^{-1} \vec{L} \times \vec{p} + r^{-1} \vec{r}.$$

Em Mecânica Quântica, ao descrevermos o comportamento de alguns sistemas físicos, também podemos construir quantidades conservadas, assim como na teoria clássica. Tais quantidades possuem análogos clássicos e um exemplo bem conhecido é o chamado vetor de Pauli-Lenz, o operador associado ao vetor de Laplace-Runge-Lenz [15], dado por

$$\vec{A} = \left(-2Ma^2\hbar^{-2}H\right)^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{a}{2\hbar^2} \left(\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}\right) + r^{-1}\vec{r}\right], \quad (3.1)$$

onde H e a são, respectivamente, o Hamiltoniano do sistema e o raio de Bohr. Neste capítulo utilizaremos o vetor de Laplace-Runge-Lenz para constuir os operadores escada para o problema de Coulomb. No entanto, para obtermos os geradores da álgebra do respectivo grupo de Lie e, conseqüentemente, os operadores escada, será necessária a introdução de outro operador

vetorial, que, assim como o vetor de Laplace-Runge-Lenz, é uma constante de movimento.

3.1 O Operador Vetorial Não-Linear \vec{C}

Um resultado conhecido é que se um sistema clássico possui constantes de movimento cujos parênteses de Poisson definem uma álgebra de Lie, então é possível encontrar, para um sistema quântico simples, operadores cujos comutadores sirvam para o mesmo propósito. Sabe-se que, em mecânica clássica, o potencial Coulombiano leva à simetria $SO(4)$ do hamiltoniano [16]. Esse fato sugere a procura, no contexto da mecânica quântica, de geradores de uma simetria análoga. Para este fim, utilizaremos o operador vetorial definido na equação (3.1) e, além deste, necessitaremos construir outro operador vetorial, de forma a obter o operador vetorial correto associado aos números quânticos que caracterizam os estados do sistema.

Assim, podemos definir o operador $\vec{F} = r^{-1}\vec{r} \times \vec{L} + \hbar^{-2}a\vec{p}L^2$, de forma que as seguintes relações de comutação sejam satisfeitas:

$$[\vec{L}^2, \vec{F}g] = -2i\hbar\vec{A}\vec{L}^2g, \quad (3.2)$$

$$[\vec{L}^2, \vec{A}] = 2\hbar^2\vec{A} + 2i\hbar\vec{F}, \quad (3.3)$$

$$[L_i, F_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}F_k, \quad (3.4)$$

$$[L_i, A_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}A_k, \quad (3.5)$$

onde g é um operador que comuta com todos os demais operadores. Podemos somar as equações (3.2) e (3.3) e usar as propriedades dos comutadores, de forma a obter

$$[\vec{L}^2, \vec{A} + i\vec{F}g] = [\vec{L}^2, i\vec{F}g] + [\vec{L}^2, \vec{A}]$$

$$\begin{aligned}
&= 2\hbar\vec{A}\vec{L}^2g + 2\hbar^2\vec{A} + 2i\hbar\vec{F} \\
&= \hbar^2(\vec{A} + i\vec{F}g)(2 + 2\hbar^{-1}\vec{L}^2g) \\
&\quad + 2i\hbar\vec{F}(1 - \hbar g - \vec{L}^2g^2).
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Para que o último termo dessa equação seja nulo devemos fazer

$$g = g^\pm = 2\hbar^{-1}(1 \pm 2S)^{-1},$$

com $S = (\hbar^{-2}\vec{L}^2 + \frac{1}{4})^{\frac{1}{2}}$, de forma que a equação (3.6) se reduz a

$$[\vec{L}^2, \vec{A} + i\vec{F}g^\pm] = \hbar^2(\vec{A} + i\vec{F}g^\pm)(2 + 2\hbar^{-1}\vec{L}^2g^\pm). \tag{3.7}$$

Além disso,

$$\begin{aligned}
2\hbar^{-1}\vec{L}^2g^\pm &= 2\hbar\left(S^2 - \frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}}2\hbar^{-1}(1 \pm 2S)^{-1} \\
&= 4\left(S \pm \frac{1}{2}\right)\left(S \mp \frac{1}{2}\right)(1 \pm 2S)^{-1} \\
&= -(1 \mp 2S);
\end{aligned}$$

substituindo a última relação na equação (3.7), obtemos

$$[\vec{L}^2, \vec{A} + i\vec{F}g^\pm] = \hbar^2(\vec{A} + i\vec{F}g^\pm)(1 \pm 2S). \tag{3.8}$$

Por fim, podemos usar os comutadores (3.4) e (3.5) para obter um novo comutador, necessário aos cálculos a seguir. Inicialmente, podemos reescrever o comutador (3.4) na forma

$$[L_i, iF_jg^\pm] = -\hbar\varepsilon_{ijk}F_kg^\pm,$$

ou, especificamente, para a coordenada z ,

$$[L_z, iF_jg^\pm] = -\hbar\varepsilon_{zjk}F_kg^\pm. \tag{3.9}$$

De maneira semelhante, podemos escrever a equação (3.5) para a componente z do momento angular, obtendo assim

$$[L_z, A_j] = i\hbar\varepsilon_{zjk}A_k. \tag{3.10}$$

Agora podemos somar as equações (3.10) e (3.9), resultando

$$\begin{aligned}
[L_z, A_j] + [L_z, iF_j g^\pm] &= [L_z, A_j + iF_j g^\pm] \\
&= i\hbar \varepsilon_{zjk} A_k - \hbar \varepsilon_{zjk} F_k g^\pm \\
&= i\hbar \varepsilon_{zjk} (A_k + iF_k g^\pm). \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Definimos então os operadores

$$\begin{aligned}
A_\pm &= A_x \pm iA_y, \\
F_\pm &= F_x \pm iF_y, \\
\vec{C}^\pm &= \vec{A} + i\vec{F}g^\pm, \\
C_\pm^\pm &= A_\pm + iF_\pm g^\pm
\end{aligned}$$

Com esses resultados, podemos passar a estudar agora a aplicação do operador $\vec{C}^\pm = \vec{A} + i\vec{F}g^\pm$ no ket $|n, l, m\rangle$. Utilizando a relação de comutação (3.8), resulta

$$L_z \vec{L}^2 C_\pm^\pm |n, l, m\rangle = L_z \left[(A_\pm + iF_\pm g^\pm) \vec{L}^2 + \hbar^2 (A_\pm + iF_\pm g^\pm) (1 \pm 2S) \right] |n, l, m\rangle,$$

ou, levando em conta que S satisfaz a equação de autovalores

$$S|n, l, m\rangle = \left(l + \frac{1}{2}\right) |n, l, m\rangle,$$

$$\begin{aligned}
L_z \vec{L}^2 C_\pm^\pm |n, l, m\rangle &= L_z \left[(A_\pm + iF_\pm g^\pm) \hbar^2 l(l+1) \right] |n, l, m\rangle \\
&\quad + L_z \left[\hbar^2 (A_\pm + iF_\pm g^\pm) (1 \pm 2l \pm 1) \right] |n, l, m\rangle \\
&= \hbar^2 (l \pm 1) (l + 1 \pm 1) L_z C_\pm^\pm |n, l, m\rangle, \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Antes de prosseguirmos com o cálculo, necessitamos obter o comutador $[L_z, C_\pm^\pm]$.

De (3.11), temos o par de equações

$$[L_z, A_x + iF_x g^\pm] = i\hbar (A_y + iF_y g^\pm), \tag{3.13}$$

$$[L_z, A_y + iF_y g^\pm] = -i\hbar (A_x + iF_x g^\pm); \tag{3.14}$$

multiplicando o último comutador por i e em seguida somando com o comutador (3.13), obtemos

$$\begin{aligned} [L_z, A_x + iA_y + iF_x g^\pm + i(iF_y g^\pm)] &= [L_z, A_+ + iF_+ g^\pm] \\ \hbar A_x + i\hbar A_y + i\hbar F_x g^\pm - \hbar F_x g^\pm &= \hbar A_+ + i\hbar F_+ g^\pm \\ &= \hbar (A_+ + iF_+ g^\pm); \end{aligned}$$

similarmente, multiplicando (3.14) por i e somando com (3.13),

$$\begin{aligned} [L_z, A_x - iA_y + iF_x g^\pm - i(iF_y g^\pm)] &= [L_z, A_- - iF_- g^\pm] \\ -\hbar A_x + i\hbar A_y - i\hbar F_x g^\pm - i\hbar F_x g^\pm &= -\hbar (A_- + iF_- g^\pm), \end{aligned}$$

de forma que

$$[L_z, A_\pm + iF_\pm g^\pm] = \pm \hbar (A_\pm + iF_\pm g^\pm).$$

Substituindo essa relação em (3.12), resulta

$$\begin{aligned} L_z \vec{L}^2 C_\pm^\pm |n, l, m\rangle &= \hbar^2 (l \pm 1) (l + 1 \pm 1) [C_\pm^\pm L_z \pm \hbar C_\pm^\pm] |n, l, m\rangle \\ &= \hbar^2 (l \pm 1) (l + 1 \pm 1) \hbar (m \pm 1) C_\pm^\pm |n, l, m\rangle, \end{aligned}$$

portanto, da última linha concluímos que C_\pm^\pm é o operador escada para os números quânticos l e m .

3.2 Fatoração do Operador C_\pm^\pm

Nessa seção iremos fatorar o operador C_\pm^\pm , gerando novos operadores que podem ser lineares em \vec{p} ou em \vec{r} .

3.2.1 Fatoração em operadores lineares em \vec{p}

Admitindo a decomposição

$$\vec{C}^\pm = \frac{a}{\hbar^2} \vec{U}^\pm R^\pm, \quad (3.15)$$

decorre imediatamente as seguintes relações:

$$\begin{aligned}
C_+^\pm &= C_x^\pm + iC_y^\pm \\
&= \frac{a}{\hbar^2} U_x^\pm R^\pm + i \frac{a}{\hbar^2} U_y^\pm R^\pm \\
&= \frac{a}{\hbar^2} (U_x^\pm + iU_y^\pm) R^\pm = \frac{a}{\hbar^2} U_+^\pm R^\pm
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
C_-^\pm &= C_x^\pm - iC_y^\pm \\
&= \frac{a}{\hbar^2} U_x^\pm R^\pm - i \frac{a}{\hbar^2} U_y^\pm R^\pm \\
&= \frac{a}{\hbar^2} (U_x^\pm - iU_y^\pm) R^\pm = \frac{a}{\hbar^2} U_-^\pm R^\pm.
\end{aligned}$$

Para que de fato a equação (3.15) seja satisfeita, os operadores \vec{U}^\pm e R^\pm devem ser dados respectivamente por

$$\begin{aligned}
\vec{U}^\pm &= \pm i r^{-1} \vec{r} \times \vec{L} + \hbar r^{-1} \vec{r} (S \pm \frac{1}{2}), \\
R^\pm &= \pm i r^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p}) - \hbar \left(S \mp \frac{1}{2} \right) r^{-1} + \hbar a^{-1} \left(S \pm \frac{1}{2} \right)^{-1}.
\end{aligned}$$

Para verificarmos que a equação (3.15) é válida devemos inicialmente reescrever \vec{U}^\pm . Para isso podemos usar a identidade $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} (\vec{A} \cdot \vec{C}) - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C}$, e assim obter

$$\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{p}) = \vec{r} (\vec{r} \cdot \vec{p}) - (\vec{r}^2) \vec{p},$$

de forma que,

$$\vec{U}^\pm = \pm i r^{-1} \vec{r} (\vec{r} \cdot \vec{p}) \mp i r^{-1} (\vec{r}^2) \vec{p} + \hbar r^{-1} \vec{r} (S \pm \frac{1}{2}).$$

Tomando o produto $\vec{U}^\pm R^\pm$ teremos

$$\begin{aligned}
\vec{U}^\pm R^\pm &= \left[\pm i r^{-1} \vec{r} (\vec{r} \cdot \vec{p}) \mp i r^{-1} (\vec{r}^2) \vec{p} + \hbar r^{-1} \vec{r} (S \pm \frac{1}{2}) \right] \times \\
&\quad \times \left[\pm i r^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p}) - \hbar \left(S \mp \frac{1}{2} \right) r^{-1} + \hbar a^{-1} \left(S \pm \frac{1}{2} \right)^{-1} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p})r^{-1}\vec{r}\cdot\vec{p}\mp i\hbar r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p})\left(S\mp\frac{1}{2}\right)r^{-1} \\
&\quad \pm i\hbar r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p})a^{-1}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1} \\
&\quad +r\vec{p}(r^{-1}\vec{r}\cdot\vec{p})\pm i\hbar r\vec{p}\left(S\mp\frac{1}{2}\right)r^{-1}\mp i\hbar r\vec{p}a^{-1}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1} \\
&\quad \pm i\hbar r^{-1}\vec{r}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)r^{-1}(\vec{r}\cdot\vec{p})-\hbar^2r^{-1}\vec{r}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)\left(S\mp\frac{1}{2}\right)r^{-1} \\
&\quad +\hbar^2r^{-1}\vec{r}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)a^{-1}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1}.
\end{aligned}$$

Para prosseguir o cálculo, devemos usar as seguintes relações

$$[\vec{r}\cdot\vec{p}, r^{-1}] = i\hbar r^{-1}, \quad (3.16)$$

$$[\vec{p}, r^{-1}] = i\hbar r^{-3}\vec{r}. \quad (3.17)$$

Comutando $(\vec{r}\cdot\vec{p})r^{-1}$ e $(\vec{r}\cdot\vec{p})\left(S\mp\frac{1}{2}\right)r^{-1}$ na primeira linha e $\vec{p}\left(S\mp\frac{1}{2}\right)r^{-1}$ na terceira linha, obtemos, após alguma álgebra

$$\begin{aligned}
\vec{U}^\pm R^\pm &= -r^2\left[\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 + \hbar^2\vec{r}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)\left(S\mp\frac{1}{2}\right)\right] \\
&\quad +r\vec{p}r^{-1}\vec{r}\cdot\vec{p} + \hbar^2a^{-1}r^{-1}\vec{r} \\
&\quad \pm i\hbar a^{-1}r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p})\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1} \\
&\quad \mp i\hbar a^{-1}r\vec{p}\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1} \\
&\quad \mp i\hbar\vec{p}\left(S\mp\frac{1}{2}\right)\left(S\pm\frac{1}{2}\right)\left(S\pm\frac{1}{2}\right)^{-1},
\end{aligned}$$

comutando o termo $\vec{p}r^{-1}$ na segunda linha e fazendo a substituição $\left(S\mp\frac{1}{2}\right)\left(S\pm\frac{1}{2}\right) = \hbar^{-2}\vec{L}^2$ na última linha, obtemos

$$\begin{aligned}
\vec{U}^\pm R^\pm &= -r^2\vec{r}\left[(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 + \vec{L}^2\right] \\
&\quad +\vec{p}(\vec{r}\cdot\vec{p}) + i\hbar r^{-2}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p}) + \hbar^2a^{-1}r^{-1}\vec{r} \\
&\quad +i\hbar^2a^{-1}\left[r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p}) - r\vec{p} + a\vec{p}\hbar^{-2}\vec{L}^2\right]\left[\pm\hbar\left(S\pm\frac{1}{2}\right)\right]^{-1} \\
&= \left\{-r^2\vec{r}\left[(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 - i\hbar(\vec{r}\cdot\vec{p}) + \vec{L}^2\right] + \vec{p}(\vec{r}\cdot\vec{p}) + \hbar^2a^{-1}r^{-1}\vec{r}\right\} \\
&\quad +i\hbar^2a^{-1}\left[r^{-1}\vec{r}(\vec{r}\cdot\vec{p}) - r\vec{p} + a\vec{p}\hbar^{-2}\vec{L}^2\right]\left[\pm\hbar\left(S\pm\frac{1}{2}\right)\right]^{-1}. \quad (3.18)
\end{aligned}$$

Na última linha da equação acima termo \vec{L}^2 pode ser simplificado usando uma identidade vetorial apropriada. No entanto, as identidades vetoriais necessitam ser rederivadas, uma vez que tais vetores se comportam como operadores diferenciais atuando sobre autofunções, sendo necessário levar em conta a não comutatividade das coordenadas de posição e momento. Assim, o termo \vec{L}^2 pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \\
&= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} r_j p_k r_l p_m \\
&= (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) r_j p_k r_l p_m \\
&= r_j p_k r_j p_k - r_j p_k r_k p_j;
\end{aligned}$$

sendo o comutador entre \vec{p} e \vec{r} dado por $[r_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$, podemos comutar os termos $p_k r_j$ e $r_k p_j$ e assim obter

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= r_j (r_j p_k - i\hbar \delta_{jk}) p_k - r_j p_k (p_j r_k + i\hbar \delta_{kj}) \\
&= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - 2i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} - r_j p_j p_k r_k \\
&= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - 2i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} - r_j p_j (r_k p_k - 3i\hbar) \\
&= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}.
\end{aligned}$$

Substituindo essa identidade no termo entre chaves na equação(3.18), obtemos

$$\begin{aligned}
\vec{U}^\pm R^\pm &= \left\{ -r^2 \vec{r} (\vec{r}^2 \vec{p}^2) + \vec{p} (\vec{r} \cdot \vec{p}) + \hbar^2 a^{-1} r^{-1} \vec{r} \right\} \\
&\quad + i\hbar^2 a^{-1} \left[r^{-1} \vec{r} (\vec{r} \cdot \vec{p}) - r \vec{p} + a \vec{p} \hbar^{-2} \vec{L}^2 \right] \left[\pm \hbar \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \right]^{-1}.
\end{aligned}$$

O primeiro termo da equação anterior é justamente o operador \vec{A} . Para verificarmos isso, inicialmente calculamos a identidade vetorial

$$\begin{aligned}
\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L} &= \varepsilon_{jik} \varepsilon_{jlm} r_l p_m p_k + \varepsilon_{kji} \varepsilon_{klm} p_j r_l p_m \\
&= -(\delta_{il} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{kl}) r_l p_m p_k + (\delta_{il} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{kl}) p_j r_l p_m \\
&= -r_l p_k p_k + r_k p_i p_k + p_j r_j p_m - p_j r_l p_j.
\end{aligned}$$

Comutando os termos $r_k p_i$, $p_j r_j$ e $p_j r_l$,

$$\begin{aligned}\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L} &= -2\vec{r}\vec{p}^2 + \vec{p}(\vec{r} \cdot \vec{p}) - i\hbar\vec{p} + r_j p_j p_m \\ &= -2\vec{r}\vec{p}^2 + \vec{p}(\vec{r} \cdot \vec{p}) - i\hbar\vec{p} + (p_m r_j + i\hbar\delta_{jm}) p_j \\ &= -2\vec{r}\vec{p}^2 + 2\vec{p}(\vec{r} \cdot \vec{p}),\end{aligned}$$

o operador \vec{A} pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{a}{2\hbar^2} (\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) + r^{-1}\vec{r} \\ &= a\hbar^{-2} [-\vec{r}\vec{p}^2 + \vec{p}(\vec{r} \cdot \vec{p})] + r^{-1}\vec{r}.\end{aligned}$$

Assim, se o primeiro termo de (3.18) for multiplicado por $a\hbar^{-2}$, temos exatamente o operador \vec{A} . Já o segundo termo da equação (3.18) é exatamente o operador $\vec{F}g^\pm$, bastando reescrevemos o operador $\vec{F}g^\pm$, definido

$$g^\pm \vec{F} = (r^{-1}\vec{r} \times \vec{L} + \hbar^{-2}apL^2) g^\pm, \quad (3.19)$$

como

$$i\hbar^2 a^{-1} \vec{F}g^\pm = i\hbar^2 a^{-1} (r^{-1}\vec{r} \times \vec{L} + \hbar^{-2}apL^2) g^\pm.$$

Portanto, (3.18) é equivalente à equação

$$i\hbar^{-2}a\vec{U}^\pm R^\pm = \vec{A} + i\vec{F}g^\pm = \vec{C}^\pm,$$

e, conseqüentemente, a equação (3.15) fica demonstrada.

3.2.2 Fatoração em Operadores Lineares em \vec{r}

A intenção agora é fatorar o operador \vec{C}^\pm em operadores lineares em \vec{r} . Com tal propósito, podemos propor uma fatoração do tipo

$$\vec{C}^\pm = \frac{1}{2}i\hbar^{-1}a\vec{V}^\pm P^\pm g^\pm \quad (3.20)$$

onde os operadores \vec{V}^\pm e P^\pm são dados respectivamente por

$$\vec{V}^\pm = \pm i p^{-1} (\vec{p} \times \vec{L}) + \hbar p^{-1} \vec{p} \left(S \pm \frac{1}{2} \right), \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} P^\pm &= i \hbar^{-1} p^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p}) (\vec{p}^2 - 2MH) + p^{-1} (\vec{p}^2 + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\mp 2p^{-1} (\vec{p}^2 - 2MH). \end{aligned} \quad (3.22)$$

A seguir iremos demonstrar a equação (3.20). Substituindo $H = (2M)^{-1} \vec{p}^2 - \hbar^2 (Ma)^{-1} r^{-1}$ no segundo termo da equação (3.22) e, em seguida, tomando o produto com $i \hbar^{-1} a V^\pm$. Como resultado, temos

$$\begin{aligned} i \hbar^{-1} a V^\pm p^{-1} (\vec{p}^2 + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) &= i \hbar^{-1} a V^\pm p^{-1} (2\vec{p}^2 - 2\hbar^2 r^{-1} a^{-1}) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &= 2i \hbar^{-1} a V^\pm p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\quad - 2i \hbar V^\pm p^{-1} r^{-1} \left(S \pm \frac{1}{2} \right), \end{aligned}$$

ou ainda, substituindo a relação $g^\pm = \hbar^{-1} [\pm (S \pm \frac{1}{2})]^{-1}$ no último termo,

$$\begin{aligned} i \hbar^{-1} a V^\pm p^{-1} (\vec{p}^2 + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) &= 2i \hbar^{-1} a V^\pm p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\mp 2i V^\pm p^{-1} r^{-1} (g^\pm)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Para avançarmos nos cálculos, necessitamos explicitar os operadores V^\pm e reescrevê-los através da relação

$$\begin{aligned} (\vec{p} \times \vec{L})_i &= -\varepsilon_{kji} \varepsilon_{klm} p_j r_l p_m \\ &= -(\delta_{jl} \delta_{im} - \delta_{jm} \delta_{il}) p_j r_l p_m \\ &= -p_j (p_i r_j + i \hbar \delta_{ij}) + (r_i p_j - i \hbar \delta_{ij}) p_j \\ &= -p_i (r_j p_j - i \hbar \delta_{jj}) - 2i \hbar (\vec{p})_i + (\vec{r})_i \vec{p}^2 \\ &= \left[-\vec{p} (\vec{r} \cdot \vec{p}) + i \hbar \vec{p} + \vec{r} p^2 \right]_i. \end{aligned}$$

Comparando essa expressão com o resultado anterior $\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L} = -2\vec{r} \vec{p}^2 + 2\vec{p} (\vec{r} \cdot \vec{p})$, obtemos

$$\vec{p} \times \vec{L} = -\frac{1}{2} (\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) + i \hbar \vec{p}.$$

Assim, V^\pm pode ser escrito como

$$\vec{V}^\pm = \mp ip^{-1} \left[\frac{1}{2} (\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) - i\hbar \vec{p} \right] + \hbar p^{-1} \vec{p} \left(S \pm \frac{1}{2} \right);$$

usando esse resultado na equação (3.23) obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar^{-1} a V^\pm p^{-1} (p^2 + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) &= 2i\hbar^{-1} a \left[\mp ip^{-1} \frac{1}{2} \vec{L} \times \vec{p} \right] p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + 2i\hbar^{-1} a \left[\pm ip^{-1} \frac{1}{2} \vec{p} \times \vec{L} \right] p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + 2i\hbar^{-1} a \left[\pm ip^{-1} (i\hbar \vec{p}) \right] p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) + 2i\hbar^{-1} a \left[\hbar p^{-1} \vec{p} \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \right] p \left(S \pm \frac{1}{2} \right) \\ &\quad \mp 2i \vec{V}^\pm p^{-1} r^{-1} (g^\pm)^{-1}; \end{aligned}$$

somando e subtraindo as quantidades $2r^{-1}\vec{r}$ e $2ir^{-1}(\vec{r} \times \vec{L})$, substituindo a relação $S^2 = (\hbar^{-2}\vec{L}^2 + \frac{1}{4})$ e reagrupando termos, chegamos ao resultado

$$i\hbar^{-1} a V^\pm p^{-1} (p + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) = 2 \left[\vec{C}^\pm - r^{-1}\vec{r} \mp i\vec{V}^\pm p^{-1} r^{-1} \right] (g^\pm)^{-1} - 2ir^{-1}\vec{r} \times \vec{L}.$$

Resolvendo esta equação para \vec{C}^\pm , obtemos

$$\begin{aligned} \vec{C}^\pm &= \pm i\hbar^{-2} a \vec{V}^\pm p^{-1} (p^2 + 2MH) + r^{-1}\vec{r} \\ &\quad \pm i\vec{V}^\pm p^{-1} r^{-1} + ir^{-1}\vec{r} \times \vec{L} (g^\pm). \end{aligned}$$

O próximo passo é somar e subtrair $\pm \frac{1}{2} i\hbar^{-2} a \vec{V}^\pm p^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p} - 2i\hbar) (p^2 - 2MH) (g^\pm)$

$$\begin{aligned} \vec{C}^\pm &= \pm \frac{1}{2} \hbar^{-2} a \vec{V}^\pm p^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p}) (p^2 - 2MH) (g^\pm) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} i\hbar^{-1} a \vec{V}^\pm p^{-1} (p^2 + 2MH) \left(S \pm \frac{1}{2} \right) (g^\pm) \\ &\quad \mp \hbar^{-1} a \vec{V}^\pm p^{-1} (p^2 - 2MH) (g^\pm) \\ &\quad \mp \frac{1}{2} \hbar^{-2} a \vec{V}^\pm p^{-1} (\vec{r} \cdot \vec{p} - 2i\hbar)^{-1} (p^2 - 2MH) (g^\pm) \\ &\quad + r^{-1}\vec{r} \pm \vec{V}^\pm p^{-1} r^{-1} + ir^{-1}\vec{r} \times \vec{L} (g^\pm). \end{aligned}$$

Esta equação pode ainda ser escrita na forma

$$\begin{aligned}
\vec{C}^\pm &= \frac{1}{2}i\hbar^{-1}a\vec{V}^\pm[\mp i\hbar^{-1}p^{-1}(\vec{r}\cdot\vec{p})(p^2 - 2MH) \\
&\quad + p^{-1}(p^2 + 2MH)\left(S \pm \frac{1}{2}\right)(g^\pm) \\
&\quad \mp 2p^{-1}(p^2 - 2MH)](g^\pm) \\
&\quad + [\mp \frac{1}{2}\hbar^{-2}a\vec{V}^\pm p^{-1}(\vec{r}\cdot\vec{p} - 2i\hbar)^{-1}(p^2 - 2MH) \\
&\quad + r^{-1}\vec{r}(g^\pm)^{-1} \pm i\vec{V}^\pm p^{-1}r^{-1}(g^\pm)^{-1}ir^{-1}\vec{r}\times\vec{L}](g^\pm),
\end{aligned}$$

onde o termo entre os primeiros colchetes é o operador P^\pm e o termo no interior dos últimos, definido por

$$\begin{aligned}
\Delta^\pm &= \mp \frac{1}{2}\hbar^{-2}a\vec{V}^\pm p^{-1}(\vec{r}\cdot\vec{p} - 2i\hbar)^{-1}(p^2 - 2MH) \\
&\quad + r^{-1}\vec{r}(g^\pm)^{-1} \pm i\vec{V}^\pm p^{-1}r^{-1}(g^\pm)^{-1}ir^{-1}\vec{r}\times\vec{L},
\end{aligned}$$

de forma que \vec{C}^\pm se reduz a

$$\vec{C}^\pm = \frac{1}{2}i\hbar^{-1}a\vec{V}^\pm P^\pm(g^\pm) + \Delta^\pm(g^\pm).$$

Contudo, através de cálculo direto, apesar de extenso, o termo $\Delta^\pm(g^\pm)$ é nulo [16]. Dessa forma, fica demonstrada a validade da equação (3.20).

3.2.3 Operadores escada U e V

Os operadores W_z^\pm e W_\pm^\pm são operadores escada para os números quânticos l e m , onde W pode ser V ou U . De fato, partindo das relações de comutação

$$\begin{aligned}
[L_z, W_\pm^\pm] &= \pm\hbar W_\pm^\pm, \\
[L^2, \vec{W}^\pm] &= \pm 2\hbar^2 \vec{W}^\pm \left(S \pm \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

e da equação de autovalor $S|lm\rangle = \left(S \pm \frac{1}{2}\right)|lm\rangle$ [16], teremos:

$$\begin{aligned}
L^2 W_z^\pm |l, m\rangle &= \left[W_z^\pm l(l+1) \pm 2\hbar^2 W_z^\pm \left(l \pm \frac{1}{2}\right) \right] |l, m\rangle \\
&= (l \pm 1)(l+1 \pm 1)\hbar^2 W_z^\pm |l, m\rangle,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$W_z^\pm |l, m\rangle = \hbar\beta^\pm |l \pm 1, m\rangle;$$

de modo análogo, temos

$$\begin{aligned} L^2 W_+^\pm |l, m\rangle &= \hbar(m+1)\hbar^2(l+1)(l+1+1)|l, m\rangle, \\ L^2 W_-^\pm |l, m\rangle &= \hbar(m-1)\hbar^2(l-1)(l+1-1)|l, m\rangle, \end{aligned}$$

indicando as relações

$$\begin{aligned} W_+^\pm |l, m\rangle &= \hbar\gamma |l+1, m+1\rangle, \\ W_-^\pm |l, m\rangle &= \hbar\delta |l-1, m-1\rangle, \end{aligned}$$

onde β , γ e δ são fatores que comutam com L^2 e L_z .

Conclusões e Perspectivas Futuras

Neste trabalho discutimos o problema geral de se encontrar soluções físicas de equações diferenciais que aparecem na Mecânica Quântica, através de métodos que fatoram o hamiltoniano, com o intuito de determinar o espectro de autovalores de observáveis físicos. Iniciamos uma abordagem elementar de fatoração, em que a parte radial do hamiltoniano do átomo de hidrogênio foi fatorada em operadores lineares nas coordenadas e momentos canônicos, em coordenadas esféricas. Apresentamos em linhas gerais o método de Infield e Hull, que sistematiza o procedimento de obtenção dos operadores escada para um potencial específico. Uma característica marcante desse método, que foi evidenciada, foi a necessidade de buscarmos soluções da equação de Riccati associada.

Notamos que ao derivar essa equação, substituímos a tarefa de resolvermos a equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão, pela de resolvermos a equação de Riccati. Desse modo, o método usual de resolução da equação de Schrödinger por polinômios de Hermite é substituído pelo método de Infield e Hull, que requer a resolução da equação de Riccati. Ainda sob a ótica do método de Infield e Hull, introduzimos operadores de fatoração para a coordenada radial do átomo de hidrogênio.

Em seções subsequentes, fizemos algumas modificações no procedimento usual. A simetria do hamiltoniano original em coordenadas esféricas levou-nos a modificar a forma dos operadores escada. Comparando as equações (1.21) e (1.22)

com as equações (1.50) e (1.51), percebemos que a forma das duas permanece inalterada se definirmos um operador momento do tipo (1.32). Para justificar a escolha desse operador momento, utilizamos na seção 1.3 uma metodologia em que admitimos a validade das equações de Hamilton clássicas. Assim, a derivada total do operador posição foi relacionada com o operador momento, e, em seguida, obtemos a forma explícita do operador momento a partir da equação de Heisenberg. Relacionamos então o operador momento a uma combinação simétrica do operador gradiente, e aplicamos esse procedimento às coordenadas angulares, resultando em operadores angulares similares aos definidos na maioria dos livros-textos. Por fim, utilizamos os operadores momento para obter os operadores escada para os potenciais coulombiano e oscilador isotrópico.

No Capítulo 2, restringimo-nos ao setor radial do hamiltoniano do átomo de hidrogênio e empregamos um método algébrico diferenciado para resolver seu espectro. A exemplo do método de Infield-Hull, o método estudado na Capítulo 2, baseado na identificação dos operadores correspondentes aos geradores do grupo de simetria, não resolve diretamente a equação de Schrödinger. Usando o fato que a álgebra $so(2, 1)$ possui relações de comutação definidas, procuramos identificar os operadores do hamiltoniano do átomo de hidrogênio que satisfazem as mesmas relações de comutação e, conseqüentemente, a álgebra associada à simetria $so(2, 1)$. Uma vez identificados os operadores que satisfazem a álgebra, é natural estudar alguns invariantes da mesma. O invariante de Casimir é um operador construído de forma a comutar com todos geradores da álgebra, possuindo papel importante ao efetuarmos os cálculos que relacionam operadores escada ao espectro do sistema físico. Ao escrevermos a equação de Schrödinger na forma adimensional (2.7), identificamos os operadores entre colchetes tal que esta fosse reescrita sob a forma (2.8), assegurando que os operadores w_1 , w_2 e w_3 , levassem ao grupo de simetria correto, uma vez que estes se relacionam com os geradores da álgebra via equações (2.13), (2.14) e (2.15). Mostramos que o operador definido em (2.15) está relacionado ao número quântico principal.

Denominados operadores de transição, definimo-los na equação (2.19) e então mostramos que os mesmos servem como operadores escada, com respeito aos níveis de energia do sistema, sendo a constante de proporcionalidade entre os estados determinada com ajuda do Casimir da álgebra. Na seção seguinte, estudamos o oscilador harmônico radial. Reescrevemos a equação de Schrödinger para o mesmo sob uma forma propícia à construção dos geradores da álgebra e dessa forma aplicamos o mesmo esquema do caso do potencial coulombiano. O invariante de Casimir usado para este problema diferiu por um fator constante.

No ultimo capítulo, estudamos a abordagem de Lange para obter os operadores escada, em que usamos quantidades conservadas no potencial coulombiano análogas a certas quantidades clássicas, bem conhecidas. Tal método possui, além do aspecto intuitivo de usar quantidades invariantes quânticas análogas às clássicas, o mérito de gerar os operadores corretos para as coordenadas. O vetor de Pauli-Lenz é a quantidade quântica associada ao vetor Laplace-Runge-Lenz e, junto com o vetor \vec{F} , vimos que as relações de comutação definidas em (3.2), (3.3), (3.4) e (3.5) nos levam a definir os operadores \vec{C}^\pm . Com certo esforço algébrico, mostramos que os operadores \vec{C}^\pm são operadores escada para os números quânticos angulares. Entretanto, restou ainda a inconveniência de \vec{C}^\pm dependerem de forma não linear dos operadores de posição e momento.

Nas seções seguintes estudamos a decomposição de \vec{C}^\pm . Obtivemos uma decomposição em que os mesmos dependiam linearmente de r e outra decomposição com dependência linear em p . A decomposição de \vec{C}^\pm em operadores lineares em p foi obtida com auxílio da definição de dois novos operadores. Por meio de cálculo direto, verificamos a consistência da decomposição, derivando identidades vetoriais que levam em conta a não comutatividade dos operadores de posição e momento. A decomposição em operadores lineares em r mostrou-se um tanto mais trabalhosa algebricamente.

Por fim, questões teóricas levantadas em nosso trabalho nos remetem em direção a determinadas idéias como perspectivas futuras, relacionadas à fatoração

de operadores hamiltonianos. Como é bem conhecido, no trabalho seminal de Infield e Hull, parte-se de uma equação diferencial transformada, sendo feita a observação que a equação diferencial original deve obedecer a certas condições para que seja possível efetuar uma transformação e colocá-la sob uma forma padrão, envolvendo um único operador diferencial de segunda ordem. Ainda nesta mesma linha, definimos operadores escada de uma forma geral, recaindo na equação de Riccati. Porém, os operadores escada definidos na seção 1.4, os quais foram construídos usando o operador momento radial correto, obtido na seção 1.3, não fatoram a equação diferencial padrão usada por Infield e Hull, mas sim a equação diferencial original. Com isso foi possível construir operadores escada de uma forma geral para o hamiltoniano não transformado, como seria desejável.

Ainda, quanto ao hamiltoniano não transformado, escrito em coordenadas esféricas, podemos estudar a equação diferencial que os operadores escada devem satisfazer, de acordo com o esquema de Fernández [3]. Por último, ressaltamos que métodos de fatoração podem ser relacionados a outros programas de quantização. A integração funcional é uma ferramenta incorporada à linguagem da física teórica nas últimas décadas, e o aparato matemático necessário à resolução das integrais de trajetória é muito variado. Nesta perspectiva, a fatoração do hamiltoniano de sistemas físicos em formas sesquilineares nos operadores de levantamento e abaixamento possibilita que os funcionais geradores, construídos como integrais de trajetória na representação holomórfica, sejam escritos de forma adequada à determinação dos propagadores da teoria.

Bibliografía

- [1] W. E. Boyce and R. C. DiPrima, *Elementary differential equations and boundary value problems*, John Wiley, New York (2001)
- [2] E. Hille, *Methods in Classical and Functional Analysis*, Addison-Wesley (1972)
- [3] L. Infeld and T. Hull, *Rev. of Mod. Phys.*, 21 (1951).
- [4] B. Mielnik, *J. Math. Phys.* 25, 3387 (1984).
- [5] D. J. Fernández C, *Lett. Math. Phys*, 8, 337 (1984).
- [6] D. J. Fernández C and N. Fernández-García, *AIP Conference Proceedings*, 744, 236 (2005).
- [7] W. Miller, *Memoirs of the American Mathematical Society*, 50, 1 (1964).
- [8] *Proceedings of the first international workshop on in quantum mechanics and quantum optics, 1999, Burgos*. On factorization method in quantum mechanics, J. Oscar Rosas-Ortiz, (1999).
- [9] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New York (2003).
- [10] Ian L. Cooper, *J. Phys. A: Math and General*, 1601 (1992).
- [11] M. Berrondot, A. Palma, *J. Phys. A: Math and General*, 773 (1979).
- [12] P. Szekeres, *A Course in Modern Mathematical Physics*, Cambridge, (2004).

- [13] S. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics*, Springer, Dordrecht, (2007).
- [14] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison Wesley, New York (2000).
- [15] K. Kobayashi, *J. Phys. A*, Great Britain, 425 (1978).
- [16] O. L. Lange and R. E. Raab, *Phys. Rev. A*, 951, 1 (1987).