

# Introdução ao grupo $SO(4)$ com aplicações à Física: transformação de Galilei e átomo de hidrogênio

Introduction to  $SO(4)$  group with applications to Physics: Galilean transformation and hydrogen atom

Anderson L. de Jesus<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal Fluminense, Instituto de Ciências Exatas, Volta Redonda, RJ, Brasil.

Recebido em 16 de janeiro de 2023. Revisado em 07 de março de 2023. Aceito em 13 de março de 2023.

Este trabalho tem como objetivo apresentar uma introdução ao grupo  $SO(4)$  e duas aplicações na Física: uma na Mecânica Clássica e outra na Mecânica Quântica. Os geradores do grupo  $SO(4)$  serão determinados, assim como sua álgebra de Lie. A aplicação na Mecânica Clássica será na obtenção da transformação de Galilei homogênea e na Mecânica Quântica será na obtenção do espectro de energia do átomo de hidrogênio, no regime não-relativístico. A versão quântica do vetor de Laplace-Runge-Lenz será fundamental para a construção da fórmula de Bohr para os níveis de energia do respectivo átomo.

**Palavras-chave:** Grupo  $SO(4)$ , transformação de Galilei, vetor de Laplace-Runge-Lenz, átomo de hidrogênio.

This work aims to present an introduction to the group  $SO(4)$  and two applications in physics: one in Classical Mechanics and other in Quantum Mechanics. The generators of the  $SO(4)$  group will be determined, as well as their Lie algebra. The application in Classical Mechanics will be in obtaining the homogeneous Galilei transformation and in Quantum Mechanics will be in obtaining the energy spectrum of the hydrogen atom, in the non-relativistic regime. The quantum version of the Laplace-Runge-Lenz vector will be fundamental for the construction of Bohr's formula for the energy levels of the respective atom.

**Keywords:**  $SO(4)$  group, Galilean transformation, Laplace-Runge-Lenz vector, hydrogen atom.

## 1. Introdução

A Teoria dos Grupos é um vasto ramo da Matemática e possui grande importância em diversas áreas do conhecimento humano. Particularmente os grupos encontram aplicações em vários ramos da Física, desde Teoria Quântica de Campos até Cosmologia, passando por teoria de Wang-Mills, Mecânica Clássica, Mecânica Quântica, Óptica, Física da Matéria Condensada entre outros [1–15]. Um grupo basicamente é uma estrutura algébrica composta por um conjunto e uma operação binária entre os elementos desse conjunto (a operação satisfazendo a propriedade de fechamento), além de três condições a serem satisfeitas, a saber: associatividade, elemento neutro e elemento inverso, com respeito à operação de grupo [16]. Se a operação é comutativa o grupo em questão é chamado abeliano, do contrário é chamado não-abeliano. Um grupo bastante interessante é aquele onde os seus elementos são matrizes quadradas invertíveis e a operação de grupo é a multiplicação usual de matrizes. Este grupo é chamado *grupo linear geral*, simbolizado por  $GL(n, K)$ , onde  $n$  é a ordem da matriz quadrada e  $K$  um corpo numérico, ao qual pertencem as componentes dessa matriz [17]. Um subgrupo muito importante desse grupo matricial é o grupo que

representa rotações próprias<sup>1</sup> no espaço Euclidiano  $\mathbb{R}^n$  chamado *grupo especial ortogonal*  $SO(n)$ , sendo o índice  $n$  a dimensão do espaço Euclidiano onde ele atua. Neste artigo nos concentraremos no caso particular do grupo especial ortogonal para  $n = 4$ , conforme discutiremos mais detalhadamente adiante.

Simetrias na Física são extremamente importantes [18], pois podem indicar quais são as quantidades conservadas em um dado sistema físico. A relação entre simetrias e leis de conservação é dada pelo célebre teorema de Noether [19, 20]. A Teoria dos Grupos desempenha um papel fundamental na descrição e organização dessas simetrias [21]. Sem entrar em maiores detalhes, simetrias na natureza se manifestam de diversas maneiras, como por exemplo as simetrias espaço-temporais e as simetrias internas, essas últimas representadas pelos chamados grupos de calibre [22]. Simetrias contínuas e discretas também ocorrem em diversas situações. Uma simetria discreta é dada por um grupo onde os elementos possuem parâmetros discretos, como o grupo de Klein das simetrias de um losango, ou o grupo diedral das simetrias de um polígono regular de  $N$  lados [23]. Simetrias contínuas são representadas por grupos com

<sup>1</sup> Rotações próprias são aquelas que preservam a orientação dos eixos de rotação. São rotações puras, no sentido que não envolvem uma reflexão dos eixos de rotação.

\* Endereço de correspondência: andersonlj@id.uff.br

parâmetros contínuos, como é o caso do grupo  $SO(n)$  ou do grupo de calibre  $SU(n)$ .

Uma classe muito importante de grupos é aquela onde além dos parâmetros serem contínuos, possui uma estrutura adicional de variedade diferenciável<sup>2</sup>. A esse grupo damos o nome de *grupo de Lie* [24], cuja representação matricial é de grande utilidade. O grupo  $SO(n)$  é um caso especial dessa categoria de grupos e será o tipo que estudaremos neste artigo. Não temos a pretensão de cobrir todo o assunto sobre os grupos  $SO(n)$  aqui, pois se trata de assunto extremamente vasto. Neste trabalho iremos nos restringir ao caso particular para  $n = 4$ . O grupo em questão é simbolizado por  $SO(4)$  e representa rotações próprias no espaço Euclidiano de quatro dimensões, simbolizado por  $\mathbb{R}^4$ . O grupo  $SO(4)$  surge em vários contextos dentro da Física [25–27] e como discutiremos mais detalhadamente neste trabalho, tal grupo encontra duas aplicações bastante interessantes: na construção da transformação de Galilei e na obtenção dos níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico [28, 29].

Na Física temos o princípio da covariância, também conhecido como *princípio da relatividade* [30], onde as leis da Física não podem depender do sistema de referência escolhido. Referenciais são de grande importância para que possamos escrever as leis que regem um dado fenômeno físico. A relação entre os referenciais inerciais<sup>3</sup> na Física não-relativística é dada pelo chamado *grupo de Galilei*, que é o grupo de simetria da Mecânica Newtoniana. Um caso particular de bastante interesse é o chamado grupo de Galilei homogêneo, que é um grupo de simetria espaço-temporal isomorfo ao grupo  $SO(4)$ , a ser estudado neste trabalho. O grupo de Galilei homogêneo é aquele que encerra as nossas conhecidas transformações de Galilei (boost de Galilei). A título de informação, no caso da Física relativística, temos um equivalente chamado grupo de Lorentz, simbolizado por  $SO(3,1)$ , onde a assinatura é da pseudo-métrica [31]. Não trataremos do grupo de Lorentz aqui.

O problema clássico de Kepler (ou problema dos dois corpos) consiste na investigação do movimento de uma partícula submetida a uma força central. Este problema foi estudado e resolvido originalmente por Newton [32], do qual derivou uma lei inverso quadrado para a força da gravidade. A Lagrangeana no problema clássico de Kepler é invariante sob rotações e evolução temporal e isto implica em duas quantidades conservadas: momento angular e energia respectivamente. Um ponto interessante é que essas duas não são as únicas simetrias presentes no problema. O problema de Kepler possui uma simetria dinâmica, que é aquela não associada a uma simetria espaço-temporal e que implica em uma carga conservada. A respectiva “carga” vem na forma de um vetor, chamado *vetor de Laplace-Runge-Lenz*. Na mecânica quântica, temos um equivalente deste vetor,

isto é, um operador hermitiano que carrega as mesmas características do análogo clássico, no que diz respeito às leis de conservação. A aplicação das simetrias do problema de Kepler, por intermédio do vetor de Laplace-Runge-Lenz, no estudo dos níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico, foi realizada inicialmente por W. Pauli em 1926 [33]. Nosso objetivo neste trabalho não é tratar o problema clássico de Kepler, aqui utilizaremos somente a versão quântica desse problema na obtenção do espectro de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico.

Em suma, o objetivo deste artigo é oferecer ao leitor uma introdução didática ao grupo  $SO(4)$  com duas aplicações na Física: uma na Física Clássica, com a dedução da transformação de Galilei homogênea e a outra na Mecânica Quântica não-relativística, com a obtenção dos níveis de energia do átomo de hidrogênio. A motivação para este trabalho está principalmente em oferecer uma contribuição, suprimindo um pouco a carência de material básico sobre o presente tema, principalmente em língua portuguesa. Apresentaremos ao final três apêndices, com cálculos detalhados para chegar a resultados importantes dentro do estudo do átomo de hidrogênio utilizando esse formalismo, algo que não é facilmente encontrado na literatura disponível. Este trabalho tem como público alvo basicamente alunos de graduação ou pós-graduação em Física, que já realizaram disciplinas básicas de Física Clássica, Álgebra Linear e Cálculo, e principalmente disciplinas sobre Teoria Básica dos Grupos (se possível abordando grupos de Lie matriciais), Mecânica Quântica básica e que possuam conhecimentos em cálculo vetorial, notação indicial e operações com colchetes de Lie. O presente trabalho está organizado da seguinte forma: na Seção 2 apresentaremos o grupo  $SO(4)$ , investigando seu comportamento na vizinhança da identidade, com a posterior obtenção de seus geradores e apresentando a sua álgebra de Lie; na Seção 3 apresentaremos duas aplicações do grupo, inicialmente com a construção da transformação de Galilei homogênea, utilizando o limite clássico e em seguida na Mecânica Quântica não-relativística do átomo de hidrogênio, determinando seu espectro de energia por meio das simetrias do problema de Kepler; finalmente, na Seção 4, apresentaremos as conclusões deste trabalho. Três apêndices, contendo vários cálculos detalhados, foram disponibilizados como um suporte extra para o leitor.

## 2. Rotações no Espaço Euclidiano Quadridimensional

Nesta seção vamos desenvolver o arcabouço teórico para o estudo das rotações no espaço Euclidiano de quatro dimensões (simbolizado por  $\mathbb{R}^4$ ). As rotações neste espaço formam uma estrutura de grupo com relação a uma operação binária, isto é, existe um conjunto de elementos obedecendo às três condições de grupo: associatividade, elemento neutro e inverso. O procedimento se inicia

<sup>2</sup> Este conceito será brevemente discutido na seção 2.

<sup>3</sup> São referenciais em relação aos quais partículas livres ou estão em repouso ou em movimento retilíneo uniforme.

estabelecendo a invariância, sob rotação, do módulo de um vetor  $\mathbf{X}$  nesse espaço. Vamos investigar então o grupo de rotações no espaço Euclidiano quadridimensional com a métrica<sup>4</sup> Euclidiana usual. Os elementos desse grupo serão denotados por  $\Gamma$ , e serão matrizes  $4 \times 4$  (grupo matricial). Um vetor  $\mathbf{X}$  em  $\mathbb{R}^4$  será escrito como um vetor coluna,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

a métrica  $g$  no espaço Euclidiano  $\mathbb{R}^4$ , considerando coordenadas cartesianas, é a matriz identidade  $I_4$  e o produto interno entre dois vetores  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$  nesse espaço é definido da maneira usual,

$$\langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle = \mathbf{X}^T g \mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y}, \quad (2)$$

onde  $\langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle \geq 0$  e a métrica  $g = I_4$ . O produto interno fica invariante sob a ação dos elementos  $\Gamma$  em vetores de  $\mathbb{R}^4$ . A ação desses elementos pode ser escrita como,

$$\mathbf{X}' = \Gamma \mathbf{X}, \quad (3)$$

A invariância do produto interno estabelece que,

$$\langle \mathbf{X}', \mathbf{Y}' \rangle = \langle \Gamma \mathbf{X}, \Gamma \mathbf{Y} \rangle = \langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle, \quad (4)$$

desenvolvendo o produto interno  $\langle \Gamma \mathbf{X}, \Gamma \mathbf{Y} \rangle$ , respeitando a condição de simetria (4),

$$\begin{aligned} \langle \Gamma \mathbf{X}, \Gamma \mathbf{Y} \rangle &= (\Gamma \mathbf{X})^T \Gamma \mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \Gamma^T \Gamma \mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \\ &= \langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

obtemos então a seguinte condição para as matrizes  $\Gamma$ ,

$$\Gamma^T \Gamma = I_4, \quad (6)$$

que é simplesmente a condição de ortogonalidade, isto é,  $\Gamma^T = \Gamma^{-1}$ . Assim concluímos que a matriz  $\Gamma$  é *ortogonal*. Um grupo cujos elementos possuem essa característica é chamado *grupo ortogonal* e no nosso caso será simbolizado por  $O(4)$ . Nesse grupo, as componentes das matrizes são números reais. O grupo  $O(4)$  é o grupo de isometrias<sup>5</sup> em  $\mathbb{R}^4$ , isto é, a sua ação sobre os elementos  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^4$  preserva o produto interno entre os mesmos (consequentemente preserva as distâncias). Utilizando a condição (6), podemos obter o determinante

dos elementos de  $O(4)$  da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \det(\Gamma^T \Gamma) &= \det I_4, \\ \det \Gamma^T \det \Gamma &= 1, \\ (\det \Gamma)^2 &= 1, \\ \det \Gamma &= \pm 1. \end{aligned} \quad (7)$$

Ou seja, o grupo  $O(4)$  possui matrizes com determinante 1 ou  $-1$ . Aqui faremos a escolha pelo  $\det \Gamma = 1$ , pois precisamos incluir o elemento identidade (a matriz  $I_4$ ) para respeitar a estrutura de grupo. Um grupo com essa característica é chamado *grupo especial*. Assim, o grupo matricial, cujos elementos obedecem à condição (6) e possuem determinante 1 será chamado *grupo especial ortogonal* de matrizes  $4 \times 4$  e será simbolizado por  $SO(4)$ . Esse grupo, cujo estudo é o objetivo central do artigo, é não-abeliano<sup>6</sup> e pode ser definido simbolicamente como,

$$SO(4) := \{\Gamma \in M_4(\mathbb{R}) / \Gamma^T \Gamma = I_4, \det \Gamma = 1\}, \quad (8)$$

com a operação de grupo sendo a multiplicação usual de matrizes (a notação  $M_4(\mathbb{R})$  representa o conjunto das matrizes  $4 \times 4$  arbitrárias, cujas componentes são números reais). O grupo  $O(4)$  possui então, com relação aos dois valores de determinantes, duas componentes disjuntas: uma componente conexa com a identidade (o grupo  $SO(4)$  definido anteriormente), associada às matrizes ortogonais com determinante 1 e uma componente composta por matrizes ortogonais  $4 \times 4$  com determinante  $-1$ . Estas últimas não formam um grupo, pois o produto de duas matrizes com determinante  $-1$  produz uma com determinante 1, o que viola a propriedade de fechamento dos grupos. As matrizes com determinante 1 representam rotações próprias e as matrizes com determinante  $-1$  representam rotações impróprias<sup>7</sup>. Neste artigo, estaremos interessados somente nas rotações próprias em  $\mathbb{R}^4$ , ou seja, as rotações implementadas pelos elementos do grupo  $SO(4)$ .

O grupo  $SO(4)$  é classificado como um grupo de Lie, que é um grupo com uma estrutura extra de variedade diferenciável (um espaço topológico que é localmente homeomorfo a um aberto do espaço Euclidiano) [34]. Assim, os elementos desse grupo (matrizes  $4 \times 4$ ) também são vistos como pontos em um espaço topológico, onde podemos trabalhar noções de vizinhança e continuidade, além de uma estrutura diferenciável. O conjunto de parâmetros contínuos do grupo  $SO(4)$ , simbolizado por  $\gamma_P = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m\}$ , sendo  $\gamma_i$  um elemento desse conjunto, terá um número  $m$  fixo de elementos (a ser obtido na subseção 2.2) e este  $m$  será identificado

<sup>4</sup> Uma métrica  $g$  é um tensor simétrico positivo-definido, de ordem dois, utilizado na medida de distâncias em um determinado espaço. Uma métrica depende do sistema de coordenadas usado e no caso particular das coordenadas cartesianas no espaço Euclidiano, a métrica é representada pela matriz identidade.

<sup>5</sup> De modo geral, o grupo  $O(n)$  é o grupo de isometrias em  $\mathbb{R}^n$ , o qual fixa uma origem e mapeia a hipersfera  $S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$  nela mesma.

<sup>6</sup> Para  $n > 2$ , o grupo  $SO(n)$  é não-abeliano.

<sup>7</sup> Rotações impróprias são aquelas que não preservam a orientação dos eixos de rotação, ou seja, são na verdade reflexões com relação à algum hiperplano. A composição de duas reflexões, entretanto, pode produzir uma rotação própria (motivo pelo qual elas não formam um grupo).

como a dimensão do grupo. Será de grande importância avaliarmos os elementos desse grupo na vizinhança do elemento neutro  $I_4$ . Essa verificação nos levará a uma estrutura matemática extremamente importante dentro dos grupos de Lie. Vamos iniciar esta tarefa na próxima subseção.

**2.1. Comportamento dos elementos de SO(4) na vizinhança da identidade**

O elemento  $\Gamma$  é uma função dos parâmetros  $\gamma_i$ , ou seja,  $\Gamma = \Gamma(\gamma_i) = \Gamma(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m)$ . Já tirando proveito da ideia de que o grupo  $SO(4)$  tem estrutura de espaço topológico, vamos expandir  $\Gamma$  em série de potências na vizinhança da identidade  $I_4$ , que é associada com o conjunto de parâmetros nulos, isto é,  $\gamma_P = \{0, 0, \dots, 0\}$ . Então,

$$\begin{aligned} \Gamma(\gamma_i) &= \Gamma(0) + \sum_{k=1}^m \gamma_k \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial \gamma_k} \right) \Big|_{\gamma_k=0} \\ &+ \frac{1}{2!} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \gamma_k \gamma_l \left( \frac{\partial}{\partial \gamma_k} \right) \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial \gamma_l} \right) \Big|_{\substack{\gamma_k=0 \\ \gamma_l=0}} \\ &+ O(\gamma_i^3), \end{aligned} \tag{9}$$

tomando o termo de primeira ordem e definindo,

$$G_k := \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial \gamma_k} \right) \Big|_{\gamma_k=0}, \tag{10}$$

os  $G_k$  são os chamados *geradores (infinitesimais) do grupo na vizinhança da identidade* e também são matrizes  $4 \times 4$ . Vamos agora considerar valores infinitesimais dos parâmetros  $\gamma_i$ , o qual indicaremos por  $\delta\gamma_i$  (rotações infinitesimais). Assim, o produto  $\delta\gamma_k \delta\gamma_l \approx 0$  (idem para os demais de ordem superior) e temos como relevante em (9) apenas o termo de primeira ordem,

$$\Gamma(\delta\gamma_k) \approx I_4 + \sum_{k=1}^m \delta\gamma_k G_k, \tag{11}$$

onde fizemos  $i \Rightarrow k$  apenas por conveniência e substituímos  $\Gamma(0)$  por  $I_4$ . Considerando então a condição de ortogonalidade (6) para dois elementos infinitesimais  $\Gamma(\delta\gamma_k)$  e  $\Gamma(\delta\gamma_l)$ , temos,

$$\begin{aligned} &\Gamma(\delta\gamma_k)^T \Gamma(\delta\gamma_l) \\ &= \left( I_4^T + \sum_{k=1}^m \delta\gamma_k G_k^T \right) \left( I_4 + \sum_{l=1}^m \delta\gamma_l G_l \right) \\ &= I_4 + \sum_{k=1}^m \delta\gamma_k G_k^T + \sum_{l=1}^m \delta\gamma_l G_l \\ &+ \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \delta\gamma_k \delta\gamma_l G_k^T G_l = I_4, \end{aligned} \tag{12}$$

nessa expressão, o termo infinitesimal  $\delta\gamma_k \delta\gamma_l \approx 0$ . Para que tenhamos uma igualdade em (12), precisamos impor que,

$$\sum_{k=1}^m \delta\gamma_k G_k^T + \sum_{l=1}^m \delta\gamma_l G_l = 0, \tag{13}$$

como cada uma das somas anteriores é uma matriz, podemos simplesmente definir, por questões de simplicidade, que  $\sum_{l=1}^m \delta\gamma_l G_l = \gamma$ . Podemos então reescrever (13) como,

$$\gamma = -\gamma^T. \tag{14}$$

Isto é, as matrizes  $\gamma$  são *anti-simétricas*. Pode-se facilmente provar que os geradores  $G_k$  obedecem à mesma relação, ou seja,  $G_k = -G_k^T$ .

**2.2. Geradores do grupo SO(4)**

Vamos determinar explicitamente os geradores  $G_k$  do grupo  $SO(4)$ . A condição (14) estabelecerá um vínculo entre as componentes da matriz  $\gamma$ . Vamos então escrever essa matriz em termos de componentes arbitrárias e construir a relação entre estas componentes para descobrir quantas delas são de fato livres. Escrevendo então,

$$\gamma = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} & \gamma_{14} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \gamma_{23} & \gamma_{24} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} & \gamma_{33} & \gamma_{34} \\ \gamma_{41} & \gamma_{42} & \gamma_{43} & \gamma_{44} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

utilizando (14) e igualando as componentes, podemos verificar que a relação entre elas é,

$$\begin{aligned} \gamma_{11} &= \gamma_{22} = \gamma_{33} = \gamma_{44} = 0, \\ \gamma_{21} &= -\gamma_{12}, \\ \gamma_{31} &= -\gamma_{13}, \\ \gamma_{41} &= -\gamma_{14}, \\ \gamma_{32} &= -\gamma_{23}, \\ \gamma_{42} &= -\gamma_{24}, \\ \gamma_{43} &= -\gamma_{34}. \end{aligned} \tag{16}$$

Por questões de simplicidade, vamos renomear as componentes não nulas da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \gamma_{12} &\Rightarrow \gamma_1, & \gamma_{23} &\Rightarrow \gamma_4, \\ \gamma_{13} &\Rightarrow \gamma_2, & \gamma_{24} &\Rightarrow \gamma_5, \\ \gamma_{14} &\Rightarrow \gamma_3, & \gamma_{34} &\Rightarrow \gamma_6. \end{aligned} \tag{17}$$

Utilizando essa notação simplificada e as relações (16), podemos reescrever a matriz (15) como,

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \\ -\gamma_1 & 0 & \gamma_4 & \gamma_5 \\ -\gamma_2 & -\gamma_4 & 0 & \gamma_6 \\ -\gamma_3 & -\gamma_5 & -\gamma_6 & 0 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

o que demonstra que das 16 componentes  $\gamma_{ij}$  de (15), apenas 6 componentes são de fato livres. Assim, o conjunto  $\gamma_P = \{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5, \gamma_6\}$  é o conjunto dos chamados *parâmetros livres* do grupo  $SO(4)$ . Para obtermos os geradores do grupo, basta decompor a matriz (18) da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \gamma = & \gamma_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{G_1} + \gamma_2 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{G_2} \\ & + \gamma_3 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{G_3} + \gamma_4 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{G_4} \\ & + \gamma_5 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{G_5} + \gamma_6 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}}_{G_6}, \end{aligned} \tag{19}$$

as matrizes  $G_1, G_2, G_3, G_4, G_5$  e  $G_6$ , reveladas na expressão (19), formam o conjunto dos *geradores (infinitesimais) do grupo  $SO(4)$* . A matriz  $\gamma$ , considerando parâmetros arbitrários, pode ser então representada como uma combinação linear desses geradores, isto é,

$$\gamma = \sum_{k=1}^6 \gamma_k G_k, \tag{20}$$

esses geradores são linearmente independentes e funcionam como vetores de base (no mesmo sentido que os vetores usuais de base em espaços vetoriais). Tais geradores formam uma base de um espaço vetorial chamado *espaço tangente na identidade*, que no caso do grupo  $SO(4)$  é simbolizado por,

$$T_{I_4}SO(4), \tag{21}$$

a matriz  $\gamma$ , dada como combinação linear dos geradores  $G_k$ , é então um “vetor” neste espaço tangente na identidade ( $\gamma \in T_{I_4}SO(4)$ ). Esta natureza de vetor tangente dos geradores  $G_k$  já foi revelada na expressão (10), se considerarmos elementos  $\Gamma$  como pertencentes a uma curva contínua no grupo, passando pela identidade  $I_4$ . Como temos aqui um total de 6 “vetores de base”, podemos concluir que essa é a *dimensão  $m$*  do grupo  $SO(4)$ , visto como um espaço topológico. De modo geral, para o grupo de Lie  $SO(n)$ , a dimensão é sempre dada pela seguinte expressão,

$$\dim[SO(n)] = \frac{n(n-1)}{2}. \tag{22}$$

O que fornece, no nosso caso, o valor  $\dim[SO(4)] = 6$  (este valor representa também o número de “planos

perpendiculares” de rotação em  $\mathbb{R}^4$ ). Diante do que já vimos até aqui, o grupo  $SO(4)$ , conforme já comentado anteriormente, tem uma estrutura de espaço topológico, especificamente de variedade diferenciável, que é uma classe de espaço topológico localmente homeomorfo a um aberto de  $\mathbb{R}^m$  (podemos estabelecer um sistema de coordenadas locais) e com uma estrutura diferenciável (podemos realizar cálculo diferencial e integral) [34]. No nosso caso, o grupo  $SO(4)$  é localmente uma “cópia” de um espaço Euclidiano  $\mathbb{R}^6$  (não confundir com o espaço Euclidiano  $\mathbb{R}^4$  sobre o qual ele age). Essa é a grande beleza dos grupos de Lie<sup>8</sup>, esses grupos possuem uma estrutura “dupla”, isto é, são ao mesmo tempo grupos (no sentido algébrico) e espaços (no sentido topológico) e assim podemos definir propriedades sobre esses grupos que não seriam possíveis em um espaço topológico usual. Não iremos discutir os aspectos gerais dos grupos de Lie neste artigo, o leitor mais interessado neste tema pode consultar as referências [24, 35–40] entre tantas outras na literatura científica.

### 2.3. Elementos do grupo $SO(4)$ em termos das matrizes $\gamma$

Podemos recuperar o elemento  $\Gamma$  (rotação finita) da seguinte forma: fazendo  $\delta\gamma_k = \gamma_k/N$  (sendo  $N$  um número natural não-nulo) e multiplicando  $N$  vezes os elementos do grupo em função dos parâmetros infinitesimais, podemos chegar na seguinte expressão,

$$\underbrace{\Gamma(\delta\gamma_k)\Gamma(\delta\gamma_k)\dots\Gamma(\delta\gamma_k)}_{N \text{ vezes}} = \left( I_4 + \sum_{k=1}^6 \frac{\gamma_k}{N} G_k \right)^N, \tag{23}$$

tomando então o limite do lado direito de (23) para  $N$  tendendo a infinito, obtemos,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left( I_4 + \sum_{k=1}^6 \frac{\gamma_k}{N} G_k \right)^N = e^{\left( \sum_{k=1}^6 \gamma_k G_k \right)}, \tag{24}$$

que é a relação fundamental entre os elementos  $\Gamma$  do grupo e seus geradores  $G_k$ , também chamado *mapa exponencial*. Considerando (20), temos então,

$$\Gamma = e^\gamma. \tag{25}$$

### 2.4. Exemplo de um elemento de $SO(4)$

Vamos determinar, como exemplo, o elemento associado com o gerador  $G_4$ , (todos os demais  $\gamma_k$  na soma (20), com  $k \neq 4$ , serão nulos), isto é,

$$\Gamma_4 = e^{\gamma_4 G_4}, \tag{26}$$

<sup>8</sup> Em um grupo de Lie, a operação de grupo e a inversão são operações suaves.

chamando o parâmetro  $\gamma_4$  de  $\theta$ , por simplicidade, e expandindo a exponencial em série de potências,

$$\Gamma_4 = e^{\theta G_4} = I_4 + \theta G_4 + \frac{\theta^2 G_4^2}{2!} + \frac{\theta^3 G_4^3}{3!} + \dots, \quad (27)$$

vamos determinar as potências do gerador  $G_4$  até a terceira ordem,

$$G_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$G_4^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

$$G_4^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (30)$$

substituindo as três matrizes anteriores em (27) e realizando as simplificações necessárias, podemos chegar no seguinte resultado,

$$\Gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \dots & \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots & 0 \\ 0 & -\theta + \frac{\theta^3}{3!} + \dots & 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (31)$$

podemos identificar em (31) as seguintes funções trigonométricas,

$$\sin \theta = \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots, \quad \cos \theta = 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \dots, \quad (32)$$

realizando essa última modificação em (31), obtemos por fim o elemento  $\Gamma_4 = \Gamma_4(\theta)$ ,

$$\Gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Com  $\theta \in [0, 2\pi[$ . Assim como o elemento  $\Gamma_4$ , outros elementos associados com os demais geradores podem ser obtidos do mesmo modo. A tarefa para obter um elemento geral envolvendo simultaneamente todos os geradores, por outro lado, é bastante complicada.

### 2.5. Álgebra de Lie do grupo SO(4)

Nesta subseção iremos apresentar uma estrutura algébrica de grande importância na teoria dos grupos de Lie. Um grupo de Lie é uma estrutura matemática que globalmente pode ser bastante complicada, dada a sua enorme não-linearidade. Entretanto todo grupo de Lie apresenta localmente uma estrutura linear

(homeomorfismo com um aberto de  $\mathbb{R}^m$ ) e como vimos no nosso caso, esta estrutura local (o espaço tangente na identidade) contém elementos que são combinações lineares (as matrizes  $\gamma$ ) dos seis geradores  $G_k$  do grupo  $SO(4)$ . Esses elementos, junto com uma operação binária chamada *comutador de Lie*<sup>9</sup>  $[\cdot, \cdot] : T_{I_4}SO(4) \times T_{I_4}SO(4) \rightarrow T_{I_4}SO(4)$ , formam uma estrutura algébrica (um espaço vetorial), chamada *álgebra de Lie* do grupo  $SO(4)$ . Esta álgebra de Lie é simbolicamente definida como,

$$so(4) := \{\gamma \in T_{I_4}SO(4) / \gamma = -\gamma^T, Tr(\gamma) = 0\}, \quad (34)$$

onde utilizamos letras minúsculas de acordo com a notação comumente encontrada na literatura. Dados dois elementos  $\gamma_A$  e  $\gamma_B$ , o comutador de Lie é definido como  $[\gamma_A, \gamma_B] := \gamma_A \gamma_B - \gamma_B \gamma_A$  e satisfaz a propriedade de fechamento, ou seja, se  $\gamma_A, \gamma_B \in T_{I_4}SO(4)$ , então  $[\gamma_A, \gamma_B] \in T_{I_4}SO(4)$ . O comutador de Lie é uma operação antissimétrica,

$$[\gamma_A, \gamma_B] = -[\gamma_B, \gamma_A], \quad (35)$$

e que obedece à identidade de Jacobi,

$$[\gamma_A, [\gamma_B, \gamma_C]] + [\gamma_B, [\gamma_C, \gamma_A]] + [\gamma_C, [\gamma_A, \gamma_B]] = 0, \quad (36)$$

uma outra propriedade que vale a pena comentar é que, de modo geral,  $\dim[SO(n)] = \dim[so(n)]$ . Vamos prosseguir renomeando os seis geradores  $G_k$  da seguinte forma,

$$\begin{aligned} G_1 &\Rightarrow M_3, & G_4 &\Rightarrow M_1, \\ G_2 &\Rightarrow M_2, & G_5 &\Rightarrow K_2, \\ G_3 &\Rightarrow K_1, & G_6 &\Rightarrow K_3, \end{aligned} \quad (37)$$

após testar cada par do conjunto de geradores, podemos obter as relações de comutação da álgebra de Lie  $so(4)$ ,

$$\begin{cases} [K_i, K_j] = \varepsilon_{ijk} M_k, \\ [M_i, M_j] = \varepsilon_{ijk} M_k, \\ [M_i, K_j] = \varepsilon_{ijk} K_k. \end{cases} \quad (38)$$

Onde os símbolos de Levi-Civita  $\varepsilon_{ijk}$ , que aparecem do lado direito, são as constantes de estrutura do grupo. Vamos definir as seguintes combinações lineares envolvendo os geradores  $M_i$  e  $K_j$ ,

$$F_i = \frac{1}{2}(M_i + K_i), \quad (39)$$

$$F'_j = \frac{1}{2}(M_j - K_j), \quad (40)$$

os parâmetros  $m_i$  e  $k_j$  serão também combinados para formar novos parâmetros,

$$f_i = m_i + k_i, \quad f'_j = m_j - k_j, \quad (41)$$

<sup>9</sup> Embora o parênteses de Lie seja definido para campos vetoriais, o comutador de Lie é definido somente para elementos do espaço tangente na identidade.

com os geradores redefinidos via (39) e (40), podemos formar novas relações de comutação (o cálculo destes comutadores é semelhante aos realizados para os comutadores em A.6, A.7 e A.8 no apêndice A),

$$\begin{cases} [F_i, F_j] = \varepsilon_{ijk} F_k, \\ [F'_i, F'_j] = \varepsilon_{ijk} F'_k, \\ [F_i, F'_j] = 0, \end{cases} \quad (42)$$

como consequência desse último conjunto de comutadores, os novos geradores  $F_i$  desacoplam dos  $F'_j$  e consequentemente,

$$\Gamma = e^{(\sum_{i=1}^3 f_i F_i)} e^{(\sum_{j=1}^3 f'_j F'_j)}, \quad (43)$$

isto é, os geradores redefinidos como  $F_i$  e  $F'_j$  formam separadamente a álgebra de Lie do grupo  $SO(3)$  (este grupo representa as rotações no espaço Euclidiano tridimensional, possui três geradores e uma única relação de comutação). Como consequência, temos para a álgebra de Lie  $so(4)$ ,

$$so(4) \simeq su(2) \otimes su(2). \quad (44)$$

Ou seja, a álgebra de Lie  $so(4)$  é isomorfa ao produto direto de duas álgebras de Lie  $su(2)$ , visto que as álgebras de Lie  $so(3)$  e  $su(2)$  são isomorfas. O grupo  $SO(3)$ , por outro lado, não é isomorfo ao grupo  $SU(2)$ , mas sim uma dupla cobertura deste (isto é, existem dois elementos do último para cada um do primeiro).

### 3. Aplicações do Grupo $SO(4)$ na Física

Vamos apresentar nesta seção duas tradicionais aplicações do grupo  $SO(4)$  na Física. A primeira aplicação será na obtenção da transformação de Galilei e a segunda será na obtenção dos níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico. Vamos a elas.

#### 3.1. Transformação de Galilei

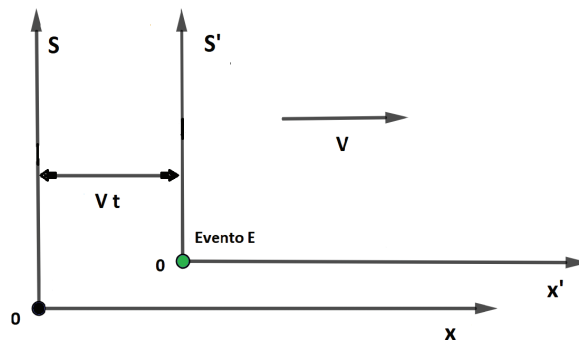
Nesta subseção entraremos em contato com a nossa primeira aplicação do grupo  $SO(4)$  na Física. Vamos obter a transformação de Galilei associada com um movimento unidirecional em  $x^1$  entre dois referenciais inerciais (Fig.1). O elemento do grupo  $SO(4)$  associado com essa transformação será obtido de,

$$\Gamma_1 = e^{\gamma_1 G_1}, \quad (45)$$

seguindo os mesmos passos vistos na subseção 2.1, chegamos a,

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (46)$$

vamos fazer este elemento atuar no vetor  $\mathbf{X}$  dado em (1), mas com a coordenada  $x^0 = kt$ , sendo  $k$  uma constante



**Figura 1:** Ilustração dos referenciais inerciais envolvidos na transformação de Galilei com um evento E ocorrendo na origem do referencial  $S'$ , que se move com velocidade  $v$  constante em relação a  $S$ .

com dimensão de velocidade e  $t$  o tempo. Como  $\mathbf{X}' = \Gamma_1 \mathbf{X}$ , a atuação resulta em,

$$\begin{cases} kt' = (kt) \cos \varphi + x^1 \sin \varphi, \\ x'^1 = -(kt) \sin \varphi + x^1 \cos \varphi, \\ x'^2 = x^2, \\ x'^3 = x^3. \end{cases} \quad (47)$$

Vamos considerar um evento E ocorrendo na origem de um referencial inercial  $S'$ , que se move na direção  $x^1$  com velocidade constante  $v$  em relação a um outro referencial inercial  $S$  (Fig. 1). As coordenadas deste evento, em um dado instante  $t$ , com relação aos dois sistemas de referência inerciais são,

$$x'^1_E = 0, \quad x^1_E = vt, \quad (48)$$

vamos partir então em busca das funções  $\sin \varphi$  e  $\cos \varphi$  que aparecem em (47). Utilizando (48) na segunda equação de (47), isto é,

$$-(kt) \sin \varphi + (vt) \cos \varphi = 0, \quad (49)$$

isolando a razão  $v/k$ ,

$$\frac{\sin \varphi}{\cos \varphi} = \frac{v}{k}, \quad (50)$$

elevando ambos os lados dessa última igualdade ao quadrado e isolando  $\sin^2 \varphi$  em seguida,

$$\sin^2 \varphi = \frac{v^2}{k^2} \cos^2 \varphi, \quad (51)$$

podemos utilizar a relação fundamental da trigonometria ( $\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi = 1$ ) combinada com o resultado anterior, para encontrar  $\cos \varphi$ . Após alguns cálculos simples, chegamos em,

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1 + v^2/k^2}}, \quad (52)$$

utilizando o resultado anterior, podemos encontrar  $\sin \varphi$ ,

$$\sin \varphi = \frac{v/k}{\sqrt{1 + v^2/k^2}}, \quad (53)$$

substituindo (52) e (53) em (47), temos,

$$\begin{cases} t' = \frac{t}{\sqrt{1+v^2/k^2}} + \frac{x^1(v/k^2)}{\sqrt{1+v^2/k^2}}, \\ x'^1 = \frac{-vt}{\sqrt{1+v^2/k^2}} + \frac{x^1}{\sqrt{1+v^2/k^2}}, \\ x'^2 = x^2, \\ x'^3 = x^3, \end{cases} \quad (54)$$

tomando agora o *limite clássico*  $k \rightarrow \infty$ , temos para os coeficientes envolvendo  $k$  os seguintes resultados,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt{1+v^2/k^2} = 1, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} (v/k^2) = 0, \quad (55)$$

considerando então esses limites nas equações (54), chegamos finalmente ao resultado esperado,

$$\begin{cases} t' = t, \\ x'^1 = x^1 - vt, \\ x'^2 = x^2, \\ x'^3 = x^3, \end{cases} \quad (56)$$

que são as conhecidas *transformações de Galilei homogêneas* na direção  $x^1$ . Podemos perceber que tomando o limite clássico (que considera a velocidade das interações infinita  $k \rightarrow \infty$ ) o tempo se torna um parâmetro constante em todos os sistemas de referência (o chamado tempo absoluto de Newton) [32].

A forma matricial da transformação de Galilei homogênea também pode ser obtida, multiplicando e dividindo, respectivamente, as componentes  $-\sin \varphi$  e  $\sin \varphi$  de (46) por  $k$  (o que equivale a retirar o  $k$  da componente  $x^0$  de  $\mathbf{X}$  e transferir para a matriz  $\Gamma_1$ ) e tomando em seguida o limite clássico  $k \rightarrow \infty$ . Como resultado, obtemos,

$$\cos \varphi = 1, \quad \sin \varphi/k = 0, \quad k \sin \varphi = v, \quad (57)$$

onde usamos (52) e (53). Substituindo então esses resultados em (46), obtemos a forma matricial da transformação de Galilei homogênea (56),

$$\mathbf{G}_1(v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Também chamado “boost” (impulso) de Galilei na direção  $x^1$  (os boosts na direção  $x^2$  e  $x^3$  são encontrados de maneira semelhante). O elemento  $\mathbf{G}_1(v)$  é um elemento do chamado *grupo de Galilei homogêneo* (representação linear) e é isomorfo ao grupo  $SO(4)$ . O elemento  $\mathbf{G}_1(v)$  tem a velocidade  $v$  como parâmetro e atua em um vetor coluna  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^4$ , com a componente  $x^0$  associada ao tempo Newtoniano [31].

Dado um terceiro referencial inercial  $S''$  se movendo com velocidade  $v_2$  em relação a  $S'$  (que se move por sua vez com velocidade  $v_1$  em relação a  $S$ ),  $\mathbf{G}_1(v_2)$  o elemento que liga  $S''$  a  $S'$  e  $\mathbf{G}_1(v_1)$ , o elemento que liga  $S'$  a  $S$ ; podemos demonstrar facilmente a lei da

composição das velocidades realizando o produto desses elementos, ou seja,  $\mathbf{G}_1(v_1)\mathbf{G}_1(v_2) = \mathbf{G}_1(v_1 + v_2)$ , onde o elemento composto relaciona os referenciais  $S$  e  $S''$  (associatividade). Também temos o elemento inverso  $\mathbf{G}_1^{-1}(v) = \mathbf{G}_1(-v)$ , associado com a troca do sentido da velocidade  $v$  relativa entre dois referenciais inerciais, bem como o elemento neutro  $\mathbf{G}_1(0) = I_4$ , associado com o repouso relativo entre dois referenciais inerciais. Estas três características garantem a estrutura de grupo, de acordo com a definição vista na introdução. O grupo de Galilei homogêneo<sup>10</sup>, entretanto, é apenas um setor do grupo de Galilei, que é um grupo de Lie com dez dimensões e que incorpora também translações no espaço e no tempo [41]. A técnica tratada nesta subseção, de obter as transformações (56) utilizando teoria de grupos, não foi a utilizada originalmente por Galilei [42].

### 3.2. O átomo de hidrogênio

Nesta subseção vamos apresentar a nossa segunda aplicação do grupo  $SO(4)$  na Física, agora dentro da Mecânica Quântica. Vamos obter o espectro de energia (caso discreto) do átomo de hidrogênio de forma algébrica, no regime não-relativístico, utilizando as simetrias do problema de Kepler e a versão quântica do vetor de Laplace-Runge-Lenz. Utilizaremos nesta seção unidades naturais<sup>11</sup> tais que  $4\pi\epsilon_0 = \hbar = e = m = 1$ . Considerando então esse sistema de unidades, o Hamiltoniano para o átomo de hidrogênio ( $Z = 1$ ) assume a seguinte forma,

$$H = -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{R}, \quad (59)$$

onde  $R = (R_1^2 + R_2^2 + R_3^2)^{1/2}$ . No problema clássico de Kepler, temos uma simetria dinâmica e conseqüentemente uma carga conservada. Tal carga é conhecida como vetor de Laplace-Runge-Lenz e o equivalente quântico dessa lei de conservação é dado pelo comutador  $[H, A_i] = 0$  [29]. A versão quântica do vetor de Laplace-Runge-Lenz (daqui em diante, abreviaremos como vetor LRL, por simplicidade), agora um operador, possui a seguinte expressão,

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{P} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{P}) - \frac{\vec{R}}{R}, \quad (60)$$

escrita na forma antissimétrica. Para escrever  $\vec{A}$  em componentes, temos que avaliar os produtos  $\vec{P} \times \vec{L}$  e  $\vec{L} \times \vec{P}$ . Vamos escrever então os vetores  $\vec{P}$  e  $\vec{L}$  em componentes<sup>12</sup> como  $\vec{P} = (P_i, P_j, P_k)$  e  $\vec{L} = (L_i, L_j, L_k)$  e usar o tensor de Levi-Civita  $\epsilon_{ijk}$  para escrever as

<sup>10</sup> Este grupo também incorpora rotações próprias, além dos já conhecidos boosts. Temos assim três geradores de rotação, com relação aos três eixos cartesianos e três boosts, cada um na direção de uma coordenada cartesiana.

<sup>11</sup> Também conhecidas como unidades atômicas de Hartree.

<sup>12</sup> Estaremos considerando aqui que  $P_j = P^j$  e  $L_k = L^k$ .



componentes<sup>13</sup> do produto vetorial, isto é,

$$(\vec{P} \times \vec{L})_i = \varepsilon_{ijk} P_j L_k, \tag{61}$$

então temos para uma componente  $A_i$ ,

$$A_i = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ijk} P_j L_k - \varepsilon_{ijk} L_j P_k) - \frac{R_i}{R}, \tag{62}$$

Vamos obter, com a ajuda do comutador  $[L_i, P_j] = i\varepsilon_{ijk} P_k$  (que será calculado no apêndice A), uma expressão hermitiana para (62). Utilizando então esse comutador para trocar o produto  $L_j P_k$  pelo produto  $P_k L_j$ , obtemos,

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ijk} P_j L_k - \varepsilon_{ijk} \{P_k L_j + i\varepsilon_{jkl} P_l\}) - \frac{R_i}{R} \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ijk} P_j L_k - \varepsilon_{ijk} P_k L_j - i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{jkl} P_l) - \frac{R_i}{R} \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ijk} P_j L_k - \varepsilon_{ikj} P_j L_k - i\varepsilon_{ikj} \varepsilon_{kjl} P_l) - \frac{R_i}{R} \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ijk} P_j L_k + \varepsilon_{ijk} P_j L_k - i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ljk} P_l) - \frac{R_i}{R} \\ &= \frac{1}{2}(2\varepsilon_{ijk} P_j L_k - i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ljk} P_l) - \frac{R_i}{R}, \end{aligned} \tag{63}$$

onde trocamos  $k$  por  $j$  e  $j$  por  $k$  no segundo e terceiro termo dentro dos parênteses (terceira linha) e restabelecemos em seguida a ordem cíclica nos índices dos tensores de Levi-Civita nestes termos (quarta linha). Utilizando agora a identidade  $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ljk} = 2\delta_{il}$  e simplificando, chegamos ao nosso resultado,

$$A_i = \varepsilon_{ijk} P_j L_k - i\delta_{il} P_l - \frac{R_i}{R}, \tag{64}$$

ou na forma vetorial,

$$\vec{A} = \vec{P} \times \vec{L} - i\vec{P} - \frac{\vec{R}}{R}, \tag{65}$$

onde  $i = \sqrt{-1}$  (não confundir com o  $i$  nos índices). Vamos apresentar agora o seguinte conjunto de comutadores envolvendo  $A_i$  e  $L_j$ ,

$$\begin{cases} [L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k \\ [A_i, A_j] = -2iH\varepsilon_{ijk} L_k, \end{cases} \tag{66}$$

onde o primeiro comutador é a já conhecida relação fundamental de comutação para o momento angular na Mecânica Quântica [43, 44], O segundo comutador será calculado no apêndice A (juntamente com outros) e o terceiro comutador será calculado detalhadamente no apêndice B. Vamos agora realizar a seguinte substituição,

$$\vec{A} = (\sqrt{-2H})\vec{B}, \tag{67}$$

o primeiro comutador permanece inalterado. O segundo comutador fica,

$$\begin{aligned} [L_i, A_j] &= \sqrt{-2H}[L_i, B_j] \\ \therefore [L_i, B_j] &= \frac{i\varepsilon_{ijk}}{\sqrt{-2H}}(\sqrt{-2H})B_k \\ \therefore [L_i, B_j] &= i\varepsilon_{ijk} B_k, \end{aligned} \tag{68}$$

e o terceiro comutador,

$$[A_i, A_j] = (\sqrt{-2H})^2[B_i, B_j] = (-2H)[B_i, B_j], \tag{69}$$

o que resulta em,

$$\begin{aligned} [B_i, B_j] &= \frac{1}{(-2H)}(-2H)i\varepsilon_{ijk} L_k \\ \therefore [B_i, B_j] &= i\varepsilon_{ijk} L_k, \end{aligned} \tag{70}$$

assim, obtemos novas relações de comutação,

$$\begin{cases} [L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k, \\ [L_i, B_j] = i\varepsilon_{ijk} B_k, \\ [B_i, B_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k, \end{cases} \tag{71}$$

com  $E < 0$  (caso discreto). A álgebra dos comutadores dada em (71) é isomorfa à álgebra de Lie  $so(4)$ , dada pelos comutadores (38). Assim, as relações de comutação entre as componentes do vetor momento angular e as componentes do vetor LRL revelam que o grupo de simetria do átomo de hidrogênio não é o grupo  $SO(3)$  (rotações em  $\mathbb{R}^3$ ), mas sim o grupo  $SO(4)$ . Vamos definir as seguintes combinações de  $\vec{L}$  e  $\vec{B}$ ,

$$\vec{J} = \frac{1}{2}(\vec{L} + \vec{B}), \tag{72}$$

$$\vec{J}' = \frac{1}{2}(\vec{L} - \vec{B}), \tag{73}$$

os comutadores  $[J_i, J_j]$ ,  $[J'_i, J'_j]$  e  $[J_i, J'_j]$  podem ser determinados e são apresentados abaixo (o cálculo detalhado desses comutadores é realizado no apêndice A),

$$\begin{cases} [J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k, \\ [J'_i, J'_j] = i\varepsilon_{ijk} B_k, \\ [J_i, J'_j] = 0. \end{cases} \tag{74}$$

Isto é, desacoplam e formam separadamente a álgebra de Lie de  $SU(2)$ . Os operadores  $J^2$  e  $J'^2$  são os operadores de Casimir<sup>14</sup> de  $SU(2)$  com autovalores  $j(j+1)$  e  $j'(j'+1)$  respectivamente e,

$$j = j' = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \tag{75}$$

podemos construir dois invariantes de Casimir para o grupo  $SO(4)$ ,

$$C_1 = J^2 + J'^2, \tag{76}$$

<sup>13</sup> Utilizaremos neste trabalho a convenção de Einstein para a soma, sobre os índices repetidos. Nesta subseção os índices sempre correrão de 1 a 3.

<sup>14</sup> Operadores de Casimir são aqueles construídos para comutarem com todos os geradores em uma representação do grupo. Também são conhecidos como invariantes de Casimir.

$$C_2 = J^2 - J'^2, \tag{77}$$

realizando o cálculo de  $J^2$  utilizando (72),

$$\begin{aligned} J^2 &= \vec{J} \cdot \vec{J} = \frac{1}{4}(\vec{L} + \vec{B}) \cdot (\vec{L} + \vec{B}) \\ &= \frac{1}{4}\{\vec{L} \cdot \vec{L} + \vec{B} \cdot \vec{L} + \vec{L} \cdot \vec{B} + \vec{B} \cdot \vec{B}\} \\ &= \frac{1}{4}\{L^2 + B^2 + \vec{B} \cdot \vec{L} + \vec{L} \cdot \vec{B}\}, \end{aligned} \tag{78}$$

e o cálculo de  $J'^2$ , utilizando agora (73),

$$\begin{aligned} J'^2 &= \vec{J}' \cdot \vec{J}' = \frac{1}{4}(\vec{L} - \vec{B}) \cdot (\vec{L} - \vec{B}) \\ &= \frac{1}{4}\{\vec{L} \cdot \vec{L} - \vec{B} \cdot \vec{L} - \vec{L} \cdot \vec{B} + \vec{B} \cdot \vec{B}\} \\ &= \frac{1}{4}\{L^2 + B^2 - \vec{B} \cdot \vec{L} - \vec{L} \cdot \vec{B}\}, \end{aligned} \tag{79}$$

substituindo os resultados (78) e (79) nos invariantes de Casimir (76) e (77), e simplificando, obtemos para esses últimos as seguintes expressões,

$$C_1 = \frac{1}{2}(L^2 + B^2), \tag{80}$$

$$C_2 = \frac{1}{2}(\vec{B} \cdot \vec{L} + \vec{L} \cdot \vec{B}), \tag{81}$$

precisamos agora avaliar  $\vec{B} \cdot \vec{L}$ . Como temos a relação  $\vec{B} \cdot \vec{L} = (\sqrt{-2H})^{-1} \vec{A} \cdot \vec{L}$ , vamos determinar o produto escalar  $\vec{A} \cdot \vec{L}$ ,

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{L} &= \left( \vec{P} \times \vec{L} - i\vec{P} - \frac{\vec{R}}{R} \right) \cdot \vec{L} \\ &= (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot \vec{L} - i\vec{P} \cdot (\vec{R} \times \vec{P}) - \frac{\vec{R}}{R} \cdot (\vec{R} \times \vec{P}) \\ &= \vec{P} \cdot (\vec{L} \times \vec{L}) - i\vec{R} \cdot (\vec{P} \times \vec{P}) - \frac{1}{R}(\vec{R} \times \vec{R}) \cdot \vec{P} \\ &= 0, \end{aligned} \tag{82}$$

onde usamos (65) e a identidade (136), apresentada do apêndice C (a prova para  $\vec{L} \cdot \vec{A}$  é semelhante). Então temos,

$$\vec{B} \cdot \vec{L} = \vec{L} \cdot \vec{B} = 0, \tag{83}$$

consequentemente  $C_2 = 0$  (os operadores  $\vec{L}$  e  $\vec{B}$  são ortogonais) o que implica diretamente em,

$$J^2 = J'^2, \tag{84}$$

ou seja, temos então  $j = j'$  (degenerescência). Dado um autoestado  $|j, m\rangle$  simultâneo<sup>15</sup> de  $L^2$  e  $H$ , o resultado da atuação de (76) neste autoestado é,

$$C_1|j, m\rangle = (J^2 + J'^2)|j, m\rangle = 2j(j+1)|j, m\rangle, \tag{85}$$

vamos trabalhar agora o operador (80), para isso precisamos da expressão para  $A^2$ . A respectiva expressão é dada a seguir,

$$A^2 = 2H(L^2 + 1) + 1, \tag{86}$$

a dedução desse resultado será realizada no apêndice C. Assim, utilizando (67) para substituir  $A^2$  em (80), o qual também atua no autoestado  $|j, m\rangle$ , temos,

$$\begin{aligned} C_1|j, m\rangle &= \frac{1}{2}(L^2 + B^2)|j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left(L^2 + \frac{A^2}{(-2H)}\right)|j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left(L^2 - \frac{A^2}{2E}\right)|j, m\rangle \end{aligned} \tag{87}$$

onde usamos<sup>16</sup>  $A^2(-2H)^{-1}|j, m\rangle = A^2(-2E)^{-1}|j, m\rangle$ . Substituindo agora a expressão (86) para  $A^2$  e prosseguindo com os cálculos, temos,

$$\begin{aligned} C_1|j, m\rangle &= \frac{1}{2}\left(L^2 - \frac{1}{2E}\{2H(L^2 + 1) + 1\}\right)|j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left(L^2 - \frac{1}{2E}2E(L^2 + 1) - \frac{1}{2E}\right)|j, m\rangle \\ &= \left(-\frac{1}{4E} - \frac{1}{2}\right)|j, m\rangle, \end{aligned} \tag{88}$$

onde considerados o fato que  $H$  e  $L^2$  comutam. Igualando então os resultados (85) e (88), temos,

$$2j(j+1) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{4E}, \tag{89}$$

ou

$$2j^2 + 2j + \frac{1}{2} = -\frac{1}{4E}, \tag{90}$$

multiplicando ambos os lados do resultado anterior por 2 e fatorando o lado esquerdo, temos,

$$(2j+1)^2 = -\frac{1}{2E}, \tag{91}$$

definindo  $(2j+1) = n$  e isolando  $E$ , obtemos finalmente,

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \tag{92}$$

Que é exatamente a fórmula de Bohr para os níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico (considerando o nosso sistema de unidades). Este método algébrico para encontrar o espectro de energia do átomo de hidrogênio, utilizando o grupo  $SO(4)$  e as simetrias do problema de Kepler via vetor LRL, foi realizado originalmente por Pauli em 1926 [33], independentemente da solução dada pela formulação ondulatória de Schrödinger para a mecânica quântica.

<sup>15</sup> Como o potencial é central, temos  $[L^2, H] = 0$ .

<sup>16</sup> Visto que  $A^2|j, m\rangle = -2B^2H|j, m\rangle = -2B^2E|j, m\rangle$ .

## 4. Conclusões

Neste artigo apresentamos uma introdução básica ao grupo  $SO(4)$  com duas aplicações na Física. A obtenção dos geradores do grupo foi realizada, por meio de uma investigação dos elementos na vizinhança da identidade. Isto levou a uma estrutura linear associada com o grupo, um espaço vetorial chamada espaço tangente na identidade. Os elementos desse espaço vetorial são relacionados com os elementos do grupo via mapa exponencial. Utilizando o mapa exponencial, um elemento do grupo  $SO(4)$  foi obtido a título de exemplo. A álgebra de Lie  $so(4)$  também foi apresentada, junto com seu conjunto de relações de comutação. A primeira aplicação foi na Mecânica Clássica com a obtenção da transformação homogênea de Galilei, utilizando o limite clássico. A segunda aplicação foi na Mecânica Quântica não-relativística, com a obtenção do espectro de energia do átomo de hidrogênio. Neste último caso, fizemos uso da versão quântica do vetor de Laplace-Runge-Lenz, obtendo um isomorfismo com a álgebra de Lie  $so(4)$ , o que levou a invariantes de Casimir, permitindo posteriormente a obtenção dos níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico. Por fim apresentamos três apêndices: o primeiro com o cálculo detalhado de vários comutadores que aparecem no problema do átomo de hidrogênio, o segundo com o cálculo detalhado do comutador  $[A_i, A_j]$  e o terceiro com o cálculo detalhado da expressão para  $A^2$ , fundamental na obtenção dos níveis de energia do respectivo átomo.

## Agradecimentos

O autor agradece ao Editor Chefe e aos Revisores pelas orientações, sugestões e pelos elogios, os quais tiveram uma enorme contribuição para o enriquecimento deste trabalho.

## Apêndice

### A. Cálculo de comutadores

Neste apêndice serão realizados os cálculos de alguns comutadores utilizados ao longo do trabalho. As relações canônicas de comutação da Mecânica Quântica também são utilizadas, a saber,

$$[R_i, P_j] = i\delta_{ij}, \quad [R_i, R_j] = [P_i, P_j] = 0, \quad (93)$$

assim como a relação canônica do momento angular  $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$ , já dada em (66). É importante lembrar que se dois operadores  $A$  e  $B$  comutam, então um comuta com uma função arbitrária do outro, ou seja  $f(A)$  comuta com  $B$  [44]. Neste trabalho sempre consideramos unidades naturais tais que  $\hbar = 1$ . Vamos relembrar também a definição do operador momento angular  $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ , que em componente é escrito como,

$$L_i = R_j P_k - R_k P_j. \quad (94)$$

#### A.1. Comutador $[L_i, P_j]$

Vamos determinar o cálculo do comutador entre  $L_i$  e  $P_j$ . Vamos utilizar a definição do operador momento angular quântico em componente (94),

$$\begin{aligned} [L_i, P_j] &= [R_j P_k - R_k P_j, P_j] \\ &= [R_j P_k, P_j] - [R_k P_j, P_j] \\ &= R_j \underbrace{[P_k, P_j]}_0 + [R_j, P_j] P_k \\ &\quad - R_k \underbrace{[P_j, P_j]}_0 - \underbrace{[R_k, P_j]}_0 P_j \\ &= [R_j, P_j] P_k = i\epsilon_{ijk} P_k, \end{aligned} \quad (95)$$

onde fizemos uso das relações (93) e introduzimos  $\epsilon_{ijk} = 1$  (ordem cíclica). Logo temos,

$$[L_i, P_j] = i\epsilon_{ijk} P_k. \quad (96)$$

#### A.2. Comutador $[L_i, R_j]$

Vamos determinar o cálculo do comutador entre  $L_i$  e  $R_j$ . Vamos utilizar novamente a definição do operador momento angular quântico em componente (94),

$$\begin{aligned} [L_i, R_j] &= [R_j P_k - R_k P_j, R_j] \\ &= [R_j P_k, R_j] - [R_k P_j, R_j] \\ &= R_j \underbrace{[P_k, R_j]}_0 + \underbrace{[R_j, R_j]}_0 P_k \\ &\quad - R_k \underbrace{[P_j, R_j]}_0 - \underbrace{[R_k, R_j]}_0 P_j \\ &= R_k [R_j, P_j] = i\epsilon_{ijk} R_k, \end{aligned} \quad (97)$$

onde utilizamos novamente as relações (93) e introduzimos  $\epsilon_{ijk} = 1$  (ordem cíclica). Logo temos,

$$[L_i, R_j] = i\epsilon_{ijk} R_k. \quad (98)$$

#### A.3. Comutador $[P_i, \frac{1}{R}]$

Vamos determinar o cálculo do comutador entre  $P_i$  e  $\frac{1}{R}$ . Sabendo-se que  $R = (R_1^2 + R_2^2 + R_3^2)^{1/2}$  pode ser escrito, utilizando notação indicial, como  $R = (R_l R_l)^{1/2}$ , temos,

$$\left[ P_i, \frac{1}{R} \right] = [P_i, R^{-1}] = [P_i, (R_l R_l)^{-1/2}], \quad (99)$$

vamos utilizar a propriedade  $[P_i, f(R_j)] = -i\delta_{ij} f'(R_j)$ , [44] sendo no nosso caso  $f(R_j) = R^{-1} = (R_l R_l)^{-1/2}$ . Calculando então a derivada de  $f(R_j)$ , ou seja,

$$f'(R_j) = -\frac{1}{2} R^{-3} \frac{\partial}{\partial R_j} R_l R_l = -\frac{2\delta_{lj} R_l}{2R^3} = -\frac{R_j}{R^3}, \quad (100)$$

substituindo esse último resultado na propriedade indicada, obtemos o resultado final para o comutador,

$$\left[ P_i, \frac{1}{R} \right] = \frac{iR_i}{R^3}. \tag{101}$$

**A.4. Comutador  $[L_i, \frac{1}{R}]$**

Vamos determinar o cálculo do comutador entre  $L_i$  e  $\frac{1}{R}$ . Vamos utilizar novamente a definição do operador momento angular quântico em componente (94),

$$\begin{aligned} \left[ L_i, \frac{1}{R} \right] &= [R_j P_k - R_k P_j, R^{-1}] \\ &= [R_j P_k, R^{-1}] - [R_k P_j, R^{-1}] \\ &= R_j [P_k, R^{-1}] + \underbrace{[R_j, R^{-1}] P_k}_0 \\ &\quad - R_k [P_j, R^{-1}] - \underbrace{[R_k, R^{-1}] P_j}_0 \\ &= \frac{iR_j R_k}{R^3} - \frac{iR_j R_k}{R^3} = 0, \end{aligned} \tag{102}$$

onde utilizamos (101) e o fato de que  $R_i$  comuta com uma função de  $R_j$  (no nosso caso  $\frac{1}{R}$ ). Logo, o resultado final para esse comutador é,

$$\left[ L_i, \frac{1}{R} \right] = 0. \tag{103}$$

**A.5. Comutador  $[L_i, A_j]$**

Vamos determinar o cálculo do comutador entre  $L_i$  e  $A_j$ . Utilizando a expressão (64), a relação canônica do momento angular e os comutadores (96), (98) e (103), temos,

$$\begin{aligned} [L_i, A_j] &= \left[ L_i, \varepsilon_{jkl} P_k L_l - i\delta_{jn} P_n - \frac{R_j}{R} \right] \\ &= \varepsilon_{jkl} P_k [L_i, L_l] + \varepsilon_{jkl} [L_i, P_k] L_l \\ &\quad - i\delta_{jn} [L_i, P_n] - \frac{1}{R} [L_i, R_j] - \underbrace{\left[ L_i, \frac{1}{R} \right] R_j}_0 \\ &= i\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ilp} P_k L_p + i\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ikq} P_q L_l \\ &\quad - i^2 \delta_{jn} \varepsilon_{inm} P_m - \frac{1}{R} i\varepsilon_{ijk} R_k, \end{aligned} \tag{104}$$

fazendo  $l \Rightarrow i, n \Rightarrow j$  e  $m \Rightarrow k$  e colocando em seguida  $i\varepsilon_{ijk}$  em evidência,

$$\begin{aligned} [L_i, A_j] &= \underbrace{i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{iip} P_k L_p + i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ikq} P_q L_i}_0 \\ &\quad - i^2 \varepsilon_{ijk} P_k - \frac{1}{R} i\varepsilon_{ijk} R_k \\ &= i\varepsilon_{ijk} \left( \varepsilon_{kqi} P_q L_i - iP_k - \frac{R_k}{R} \right) \\ &= i\varepsilon_{ijk} A_k, \end{aligned} \tag{105}$$

onde verificamos que o termo dentro do parênteses é justamente a componente  $A_k$ . Assim, o resultado final para este comutador é,

$$[L_i, A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k. \tag{106}$$

**A.6. Comutador  $[J_i, J_j]$**

Este comutador foi apresentado em (74). Usando (72) e as relações de comutação em (71), temos,

$$\begin{aligned} [J_i, J_j] &= \frac{1}{4} [(L_i + B_i), (L_j + B_j)] \\ &= \frac{1}{4} \{ [L_i, L_j] + [B_i, L_j] + [L_i, B_j] + [B_i, B_j] \} \\ &= \frac{1}{4} \{ i\varepsilon_{ijk} L_k + i\varepsilon_{ijk} B_k + i\varepsilon_{ijk} B_k + i\varepsilon_{ijk} L_k \} \\ &= \frac{i\varepsilon_{ijk}}{2} (L_k + B_k) = i\varepsilon_{ijk} J_k, \end{aligned} \tag{107}$$

logo, o resultado final é,

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k. \tag{108}$$

**A.7. Comutador  $[J'_i, J'_j]$**

Este comutador foi apresentado em (74), Usando (73) e as relações de comutação (71), temos,

$$\begin{aligned} [J'_i, J'_j] &= \frac{1}{4} [(L_i - B_i), (L_j - B_j)] \\ &= \frac{1}{4} \{ [L_i, L_j] - [B_i, L_j] - [L_i, B_j] + [B_i, B_j] \} \\ &= \frac{1}{4} \{ i\varepsilon_{ijk} L_k - i\varepsilon_{ijk} B_k - i\varepsilon_{ijk} B_k + i\varepsilon_{ijk} L_k \} \\ &= \frac{i\varepsilon_{ijk}}{2} (L_k - B_k) = i\varepsilon_{ijk} J'_k, \end{aligned} \tag{109}$$

logo, o resultado final é,

$$[J'_i, J'_j] = i\varepsilon_{ijk} J'_k. \tag{110}$$

**A.8. Comutador  $[J_i, J'_j]$**

Este comutador foi apresentado em (74). O cálculo é semelhante aos dos dois últimos,

$$\begin{aligned} [J_i, J'_j] &= \frac{1}{4} [(L_i + B_i), (L_j - B_j)] \\ &= \frac{1}{4} \{ [L_i, L_j] + [B_i, L_j] - [L_i, B_j] - [B_i, B_j] \} \\ &= \frac{1}{4} \{ i\varepsilon_{ijk} L_k - i\varepsilon_{ijk} B_k + i\varepsilon_{ijk} B_k - i\varepsilon_{ijk} L_k \} \\ &= 0, \end{aligned} \tag{111}$$

logo, temos o nosso resultado final,

$$[J_i, J'_j] = 0. \tag{112}$$

## B. Cálculo do comutador $[A_i, A_j]$

Neste apêndice realizaremos o cálculo do comutador entre  $A_i$  e  $A_j$ . Vamos iniciar escrevendo a forma explícita dessas componentes dentro do comutador e utilizar as propriedades operatórias dos comutadores para separar os termos. Vamos provisoriamente trocar o índice  $j$  pelo  $l$ , por conveniência. Assim,

$$\begin{aligned}
 [A_i, A_l] &= \left[ \varepsilon_{ijk} P_j L_k - i\delta_{ia} P_a - \frac{R_i}{R}, \varepsilon_{lmn} P_m L_n \right. \\
 &\quad \left. - i\delta_{lb} P_b - \frac{R_l}{R} \right] \\
 &= [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] \\
 &\quad + [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, -i\delta_{lb} P_b] \\
 &\quad + \left[ \varepsilon_{ijk} P_j L_k, -\frac{R_l}{R} \right] + [-i\delta_{ia} P_a, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] \\
 &\quad + [-i\delta_{ia} P_a, -i\delta_{lb} P_b] + \left[ -i\delta_{ia} P_a, -\frac{R_l}{R} \right] \\
 &\quad + \left[ -\frac{R_i}{R}, \varepsilon_{lmn} P_m L_n \right] + \left[ -\frac{R_i}{R}, -\delta_{lb} P_b \right] \\
 &\quad + \left[ -\frac{R_i}{R}, -\frac{R_l}{R} \right]. \tag{113}
 \end{aligned}$$

Temos então um total de nove comutadores. Vamos determinar separadamente cada um deles e depois adicionar os resultados para compor o valor final. Vamos analisá-los na ordem em que eles aparecem em (113),

### 1º comutador: $[\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n]$

Vamos iniciar o cálculo deste comutador aplicando as propriedades operatórias dos comutadores,

$$\begin{aligned}
 [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} [P_j L_k, P_m L_n] \\
 &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} (P_j [L_k, P_m L_n] + [P_j, P_m L_n] L_n) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} (P_j P_m [L_k, L_n] + P_j [L_k, P_m] L_n \\
 &\quad + P_m [P_j, L_n] L_k + \underbrace{[P_j, P_m]}_0 L_m) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} (P_j P_m \{i\varepsilon_{knq} L_q\} + P_j \{i\varepsilon_{kmr} P_r\} L_n \\
 &\quad + P_m \{-i\varepsilon_{jns} P_s\} L_k) \\
 &= i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{knq} P_j P_m L_q + i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{kmr} P_j P_r L_n \\
 &\quad - i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{jns} P_m P_s L_k, \tag{114}
 \end{aligned}$$

onde utilizamos a relação de comutação canônica do momento linear, angular e o comutador (96). O resultado do cálculo anterior contém três termos, vamos determinar

o valor do primeiro,

$$\begin{aligned}
 i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{knq} P_j P_m L_q &= i\varepsilon_{ijk} (\varepsilon_{lmn} \varepsilon_{knq}) P_j P_m L_q \\
 &= i\varepsilon_{ijk} (\delta_{lq} \delta_{mk} - \delta_{lk} \delta_{mq}) P_j P_m L_q \\
 &= i\varepsilon_{ijk} (\delta_{lq} \delta_{mk} P_j P_m L_q - \delta_{lk} \delta_{mq} P_j P_m L_q) \\
 &= i\varepsilon_{ijk} (P_j P_k L_l - \delta_{lk} P_j P_m L_m), \tag{115}
 \end{aligned}$$

onde utilizamos a conhecida identidade envolvendo os símbolos de Levi - Civita e as deltas de Kronecker:  $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$  (atente só para as escolhas particulares dos índices). Esta identidade será usada algumas outras vezes daqui pra frente e sempre nos referiremos a ela, por questões de simplicidade, como “identidade das deltas”. O cálculo para os demais termos é o mesmo (respeitando os respectivos índices) e os resultados são, respectivamente,

$$\begin{aligned}
 i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{kmr} P_j P_r L_n &= -i\varepsilon_{ijk} (P_j P_l L_k - \delta_{lk} P_j P_n L_n), \tag{116}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{jns} P_m P_s L_k &= -i\varepsilon_{ijk} (P_j P_l L_k - \delta_{lk} P_m P_m L_k), \tag{117}
 \end{aligned}$$

reunindo os resultados (115, (116) e (117) em (114), temos,

$$\begin{aligned}
 [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] &= i\varepsilon_{ijk} (P_j P_k L_l \\
 &\quad - \delta_{lk} P_j P_m L_m + \delta_{lk} P_j P_n L_n - P_j P_l L_k \\
 &\quad + \delta_{lj} P_m P_m L_k - P_j P_l L_k) \\
 &= i\varepsilon_{ijk} (P_j P_k L_l - 2P_j P_l L_k + \delta_{lj} P^2 L_k), \tag{118}
 \end{aligned}$$

onde fizemos  $n \Rightarrow m$  e escrevemos  $P_m P_m = P^2$ . Como  $i\varepsilon_{ijk} P_j P_k = (\vec{P} \times \vec{P})_i = 0$ , chegamos em,

$$\begin{aligned}
 [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] &= -2i\varepsilon_{ijk} P_j P_l L_k + i\varepsilon_{ijk} \delta_{lj} P^2 L_k, \tag{119}
 \end{aligned}$$

fazendo  $j \Rightarrow l$  e colocando  $P_l P_l = P^2$ , temos o resultado final para o 1º comutador,

$$[\varepsilon_{ijk} P_j L_k, \varepsilon_{lmn} P_m L_n] = -i\varepsilon_{ilk} P^2 L_k. \tag{120}$$

### 2º comutador: $[\varepsilon_{ijk} P_j L_k, -i\delta_{lb} P_b]$

O cálculo desse comutador segue abaixo,

$$\begin{aligned}
 [\varepsilon_{ijk} P_j L_k, -i\delta_{lb} P_b] &= -i\delta_{lb} \varepsilon_{ijk} [P_j L_k, P_b] \\
 &= -i\delta_{lb} \varepsilon_{ijk} (P_j [L_k, P_b] \\
 &\quad + \underbrace{[P_j, P_b]}_0 L_k)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -i\delta_{lb}\varepsilon_{ijk}P_j(i\varepsilon_{kbc}P_c) &= -i\delta_{il}\frac{P_jR_j}{R} + i\frac{P_lR_i}{R} \\
 &= \delta_{lb}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kbc}P_jP_c && -i\varepsilon_{ijk}\frac{R_lR_jL_k}{R^3} + i\varepsilon_{ilk}\frac{L_k}{R}. \quad (123) \\
 &= \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klc}P_jP_c \\
 &= (\delta_{il}\delta_{jc} - \delta_{ic}\delta_{jl})P_jP_c \\
 &= \delta_{il}\delta_{jc}P_jP_c - \delta_{ic}\delta_{jl}P_jP_c \\
 &= \delta_{il}P_jP_j - P_lP_i \\
 &= \delta_{li}P^2 - P_lP_i, \quad (121)
 \end{aligned}$$

onde utilizamos a identidade das deltas, a relação canônica para o momento linear e o comutador (96). logo, temos o nosso resultado final para o 2º comutador,

$$[\varepsilon_{ijk}P_jL_k, -i\delta_{lb}P_b] = \delta_{li}P^2 - P_lP_i. \quad (122)$$

**3º comutador:**  $[\varepsilon_{ijk}P_jL_k, -\frac{R_l}{R}]$

O cálculo desse comutador é um pouco mais trabalhoso. Vamos iniciar utilizando novamente as propriedades operatórias e em seguida utilizar o resultado de alguns comutadores já apresentados no apêndice A,

$$\begin{aligned}
 \left[\varepsilon_{ijk}P_jL_k, -\frac{R_l}{R}\right] &= -\varepsilon_{ijk}\left[P_jL_k, \frac{R_l}{R}\right] \\
 &= -\varepsilon_{ijk}\left(P_j\left[L_k, \frac{R_l}{R}\right] + \left[P_j, \frac{R_l}{R}\right]L_k\right) \\
 &= -\varepsilon_{ijk}\left(P_jP_l\underbrace{\left[L_k, \frac{1}{R}\right]}_0 + P_j[L_k, R_l]\frac{1}{R}\right. \\
 &\quad \left.+ R_l\left[P_j, \frac{1}{R}\right]L_k + [P_j, R_l]\frac{L_k}{R}\right) \\
 &= -\varepsilon_{ijk}\left(P_j(i\varepsilon_{klc}R_c)\frac{1}{R}\right. \\
 &\quad \left.+ R_l\left(\frac{iR_j}{R^3}\right)L_k + (-i\delta_{lj})\frac{L_k}{R}\right) \\
 &= -i\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lck}\frac{P_jR_c}{R} - i\varepsilon_{ijk}\frac{R_lR_jL_k}{R} \\
 &\quad + i\varepsilon_{ijk}\delta_{lj}\frac{L_k}{R} \\
 &= -i(\delta_{il}\delta_{jc} - \delta_{ic}\delta_{jl})\frac{P_jR_c}{R} \\
 &\quad - i\varepsilon_{ijk}\frac{R_lR_jL_k}{R^3} + i\varepsilon_{ilk}\frac{L_k}{R} \\
 &= -i\delta_{il}\delta_{jc}\frac{P_jR_c}{R} + i\delta_{ic}\delta_{jl}\frac{P_jR_c}{R} \\
 &\quad - i\varepsilon_{ijk}\frac{R_lR_jL_k}{R^3} + i\varepsilon_{ilk}\frac{L_k}{R}
 \end{aligned}$$

Chegamos a um resultado intermediário. Vamos agora trabalhar o terceiro termo do resultado anterior: usando a relação de comutação (98) para trocar  $R_lL_k$  por  $L_kR_l$  e usando novamente a identidade com as deltas, temos,

$$\begin{aligned}
 -i\varepsilon_{ijk}\frac{R_jR_lL_k}{R^3} &= i\varepsilon_{ijk}\frac{R_j(L_kR_l - i\varepsilon_{klm}R_m)}{R^3} \\
 &= -\frac{i\varepsilon_{ijk}R_jL_kR_l}{R^3} - \frac{\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lmk}R_jR_m}{R^3} \\
 &= -\frac{i(\vec{R} \times \vec{L})_iR_l}{R^3} \\
 &\quad - \frac{(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})R_jR_m}{R^3} \\
 &= -\frac{i(\vec{R} \times \vec{L})_iR_l}{R^3} - \frac{\delta_{il}\delta_{jm}R_jR_m}{R^3} \\
 &\quad + \frac{\delta_{im}\delta_{jl}R_jR_m}{R^3} \\
 &= -\frac{i(\vec{R} \times \vec{L})_iR_l}{R^3} - \frac{\delta_{il}}{R} \\
 &\quad + \frac{R_lR_i}{R^3}, \quad (124)
 \end{aligned}$$

substituindo esse último resultado em (123), temos finalmente o resultado do 3º comutador,

$$\begin{aligned}
 \left[\varepsilon_{ijk}P_jL_k, -\frac{R_l}{R}\right] &= -i\delta_{il}\frac{P_jR_j}{R} + i\frac{P_lR_i}{R} \\
 &\quad + \frac{R_lR_i}{R^3} - \frac{i(\vec{R} \times \vec{L})_iR_l}{R^3} \\
 &\quad - \frac{\delta_{il}}{R} + i\varepsilon_{ilk}\frac{L_k}{R}. \quad (125)
 \end{aligned}$$

**4º comutador:**  $[-i\delta_{ia}P_a, \varepsilon_{lmn}P_mL_n]$

O cálculo deste comutador é o mesmo empregado no caso do 2º comutador. O resultado difere daquele por uma troca de sinal em todos os termos. Temos então,

$$[-i\delta_{ia}P_a, \varepsilon_{lmn}P_mL_n] = P_lP_i - \delta_{li}P^2. \quad (126)$$

**5º comutador:**  $[-i\delta_{ia}P_a, -i\delta_{lb}P_b]$

O valor deste comutador é zero, considerando a relação de comutação canônica para o operador momento linear. Temos então,

$$[-i\delta_{ia}P_a, -i\delta_{lb}P_b] = -\delta_{ia}\delta_{lb}[P_a, P_b] = 0. \quad (127)$$

**6º comutador:**  $[-i\delta_{ia}P_a, -\frac{R_l}{R}]$

O cálculo desse comutador segue abaixo,

$$\begin{aligned} \left[-i\delta_{ia}P_a, -\frac{R_l}{R}\right] &= i\delta_{ia} \left[P_a, \frac{R_l}{R}\right] \\ &= i\delta_{ia} \left(R_l \left[P_a, \frac{1}{R}\right] + [P_a, R_l] \frac{1}{R}\right) \\ &= i\delta_{ia}R_l \left(\frac{iR_a}{R^3}\right) + i\delta_{ia}(-i\delta_{la}) \frac{1}{R} \\ &= -\delta_{ia} \frac{R_lR_a}{R^3} + \delta_{ia}\delta_{al} \frac{1}{R} \\ &= -\frac{R_lR_i}{R^3} + \delta_{il} \frac{1}{R}, \end{aligned} \tag{128}$$

onde usamos o comutador (101), a relação de comutação canônica para a posição e momento linear e a propriedade  $\delta_{ia}\delta_{al} = \delta_{il}$ . logo, o resultado final para o 6º comutador é,

$$\left[-i\delta_{ia}P_a, -\frac{R_l}{R}\right] = -\frac{R_lR_i}{R^3} + \frac{\delta_{il}}{R}. \tag{129}$$

**7º comutador:**  $[-\frac{R_i}{R}, \varepsilon_{lmn}P_mL_n]$

O cálculo deste comutador é praticamente o mesmo realizado no caso do 3º comutador. O presente resultado difere daquele por uma permutação nos índices  $i$  e  $l$  no termo com o produto vetorial e por uma troca de sinal em todos os termos. O resultado então é,

$$\begin{aligned} \left[-\frac{R_i}{R}, \varepsilon_{lmn}P_mL_n\right] &= i\delta_{il} \frac{P_mR_m}{R} - i \frac{P_lR_i}{R} \\ &\quad - \frac{R_lR_i}{R^3} + \frac{i(\vec{R} \times \vec{L})_lR_i}{R^3} \\ &\quad + \frac{\delta_{il}}{R} - i\varepsilon_{iln} \frac{L_n}{R}. \end{aligned} \tag{130}$$

**8º comutador:**  $[-\frac{R_i}{R}, -i\delta_{lb}P_b]$

O cálculo deste comutador é basicamente o mesmo realizado para o 6º comutador. O presente resultado difere daquele apenas por uma troca de sinal em todos os termos. Temos então,

$$\left[-\frac{R_i}{R}, -i\delta_{lb}P_b\right] = \frac{R_lR_i}{R^3} - \frac{\delta_{il}}{R}. \tag{131}$$

**9º comutador:**  $[-\frac{R_i}{R}, -\frac{R_l}{R}]$

O valor desse comutador é zero, considerando que (como já foi comentado no início do apêndice A) se dois operadores comutam (no nosso caso,  $R_i$  e  $R_l$ ). então um

deles comuta com uma função arbitrária do outro (no nosso caso,  $\frac{1}{R}$ ). Temos então,

$$\left[-\frac{R_i}{R}, -\frac{R_l}{R}\right] = 0. \tag{132}$$

Vamos reunir todos esses nove resultados em (113). Após simplificar, cancelando todos os pares de termos que diferem apenas pelo sinal, obtemos,

$$\begin{aligned} [A_i, A_l] &= -i\varepsilon_{ilk}P^2L_k + i \frac{(\vec{R} \times \vec{L})_lR_i - (\vec{R} \times \vec{L})_iR_l}{R^3} \\ &\quad + \frac{iP_lR_i}{R} - \frac{iP_iR_l}{R} + i\varepsilon_{ilk} \frac{L_k}{R} \\ &\quad - i\varepsilon_{lin} \frac{L_n}{R}, \end{aligned} \tag{133}$$

utilizando então a identidade  $(\vec{R} \times \vec{L})_lR_i - (\vec{R} \times \vec{L})_iR_l = R^2(P_iR_l - P_lR_i)$ , permutando os índices  $i$  e  $l$  no último termo (trocando também  $n \Rightarrow k$ ) e realizando as simplificações necessárias, chegamos em,

$$\begin{aligned} [A_i, A_j] &= -i\varepsilon_{ijk}P^2L_k + 2i\varepsilon_{ijk} \frac{L_k}{R} \\ &= -2i \left(\frac{P^2}{2} - \frac{1}{R}\right) \varepsilon_{ijk}L_k, \end{aligned} \tag{134}$$

onde trocamos  $l \Rightarrow j$  por conveniência. Como a expressão dentro do parênteses é exatamente o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio não-relativístico (59), podemos escrever o resultado final para o nosso comutador,

$$[A_i, A_j] = -2iH\varepsilon_{ijk}L_k. \tag{135}$$

### C. Cálculo de $A^2$

Neste último apêndice iremos realizar os cálculos necessários para obter a expressão  $A^2$ , apresentada em (86). Esse resultado foi fundamental na subseção 3.2, para chegarmos na fórmula de Bohr para os níveis de energia do átomo de hidrogênio não-relativístico. Antes de iniciar nossa tarefa, vamos apresentar duas identidades que serão muito utilizadas na demonstração de  $A^2$ ,

#### 1º identidade

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C} \tag{136}$$

*Demonstração:*

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) &= A_i(\varepsilon_{ijk}B_jC_k)_i \\ &= (\varepsilon_{kij}A_iB_j)_kC_k \\ &= (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C}. \end{aligned} \tag{137}$$

#### 2º identidade

$$\vec{A} \times \vec{L} = 2i\vec{A} - \vec{L} \times \vec{A} \tag{138}$$

*Demonstração:*

$$\begin{aligned}
 (\vec{A} \times \vec{L})_i &= \varepsilon_{ijk} A_j L_k \\
 &= \varepsilon_{ijk} (L_k A_j - i \varepsilon_{kjn} A_n) \\
 &= \varepsilon_{ijk} (L_k A_j + i \varepsilon_{nj k} A_n) \\
 &= \varepsilon_{ijk} L_k A_j + i \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{nj k} A_n \\
 &= \varepsilon_{ijk} L_k A_j + 2i \delta_{in} A_n \\
 &= -\varepsilon_{ikj} L_k A_j + 2i A_i \\
 &= (-\vec{L} \times \vec{A} + 2i \vec{A})_i. \tag{139}
 \end{aligned}$$

Onde usamos (106) e a propriedade  $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{nj k} = 2\delta_{in}$ . Seguindo agora para o objetivo do apêndice, que é o cálculo da quantidade  $A^2$ , vamos considerar inicialmente um estado  $\psi$  e utilizar a expressão para  $\vec{A}$  (65),

$$\begin{aligned}
 A^2 \psi &= \vec{A} \cdot \vec{A} \psi \\
 &= \left( \vec{P} \times \vec{L} - i\vec{P} - \frac{\vec{R}}{R} \right) \cdot \left( \vec{P} \times \vec{L} - i\vec{P} - \frac{\vec{R}}{R} \right) \psi \\
 &= (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi - i\vec{P} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi \\
 &\quad - \frac{1}{R} \vec{R} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi - (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot i\vec{P} \psi + i^2 \vec{P} \cdot \vec{P} \psi \\
 &\quad + i \frac{1}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} \psi - (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi + i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi \\
 &\quad + \frac{1}{R^2} \vec{R} \cdot \vec{R} \psi, \tag{140}
 \end{aligned}$$

temos então um total de nove termos. Vamos determinar cada um deles separadamente, seguindo a ordem em que eles aparecem em (140).

**1º termo:**  $(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi$

Vamos começar escrevendo este termo utilizando o tensor de Levi-Civita para o produto vetorial,

$$(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmk} P_i L_j P_l L_m \psi, \tag{141}$$

usando a identidade das deltas, obtemos,

$$\begin{aligned}
 (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) P_i L_j P_l L_m \psi \\
 &= \delta_{il} \delta_{jm} P_i L_j P_l L_m \psi \\
 &\quad - \delta_{im} \delta_{jl} P_i L_j P_l L_m \psi, \tag{142}
 \end{aligned}$$

fazendo  $l \Rightarrow i, m \Rightarrow j$  na primeira parcela e  $m \Rightarrow i, l \Rightarrow j$  na segunda, temos,

$$(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi = P_i L_j P_i L_j \psi - P_i L_j P_j L_i \psi, \tag{143}$$

o produto  $L_j P_i$  na primeira parcela pode ser substituído utilizando o comutador (96) e o produto  $L_j P_j$  na

segunda parcela é a mesma coisa que  $\vec{L} \cdot \vec{P}$ , então,

$$\begin{aligned}
 (\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi &= P_i (P_i L_j - i \varepsilon_{ijk} P_k) L_j \psi \\
 &\quad - P_i (L_j P_j) L_i \psi \\
 &= P^2 L^2 \psi - i \varepsilon_{ijk} P_i P_k L_j \psi \\
 &\quad - P_i (\vec{L} \cdot \vec{P}) L_i \psi, \tag{144}
 \end{aligned}$$

como  $\varepsilon_{ijk} P_i P_k = -\varepsilon_{jik} P_i P_k = -(\vec{P} \times \vec{P})_j = 0$  e pela identidade (136),  $\vec{L} \cdot \vec{P} = (\vec{R} \times \vec{P}) \cdot \vec{P} = \vec{R} \cdot (\vec{P} \times \vec{P}) = 0$ , temos enfim,

$$(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi = P^2 L^2 \psi. \tag{145}$$

**2º termo:**  $-i\vec{P} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi$

Este termo é simples de calcular. Utilizando a identidade (136), temos,

$$-i\vec{P} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi = -i(\vec{P} \times \vec{P}) \cdot \vec{L} \psi = 0. \tag{146}$$

**3º termo:**  $-\frac{1}{R} \vec{R} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi$

O cálculo deste termo segue a mesma ideia do anterior. Usando novamente a identidade (136), temos,

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{R} \vec{R} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi &= -\frac{1}{R} (\vec{R} \times \vec{P}) \cdot \vec{L} \psi = -\frac{1}{R} \vec{L} \cdot \vec{L} \psi \\
 &= -\frac{1}{R} L^2 \psi. \tag{147}
 \end{aligned}$$

**4º termo:**  $-(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot i\vec{P} \psi$

Usando as identidades (136) e (138), temos,

$$\begin{aligned}
 -(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot i\vec{P} \psi &= -i\vec{P} \cdot (\vec{L} \times \vec{P}) \psi \\
 &= -i\vec{P} \cdot (2i\vec{P} - \vec{P} \times \vec{L}) \psi \\
 &= 2P^2 \psi + i\vec{P} \cdot (\vec{P} \times \vec{L}) \psi \\
 &= 2P^2 \psi + i \underbrace{(\vec{P} \times \vec{P}) \cdot \vec{L}}_0 \psi \\
 &= 2P^2 \psi. \tag{148}
 \end{aligned}$$

**5º termo:**  $i^2 \vec{P} \cdot \vec{P} \psi$

O cálculo deste termo é direto. O resultado simplesmente é,

$$i^2 \vec{P} \cdot \vec{P} \psi = -P^2 \psi. \tag{149}$$

**6º termo:**  $i \frac{1}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} \psi$

Este termo não será alterado. Os demais termos contendo o produto escalar  $\vec{P} \cdot \vec{R}$  serão trabalhados de forma a exibirem o produto  $\vec{R} \cdot \vec{P}$ .



**7º termo:**  $-(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi$

Utilizando a identidade (138), vamos reescrever o produto vetorial dentro dos parênteses,

$$\begin{aligned} -(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi &= -(2i\vec{P} - \vec{L} \times \vec{P}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi \\ &= -2i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi \\ &\quad + (\vec{L} \times \vec{P}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi, \end{aligned} \tag{150}$$

onde o resultado é composto por duas parcelas. A primeira parcela precisa de um pouco de atenção. Usando  $[\vec{R}, \vec{P}] = 3i$  para trocar o produto  $\vec{P} \cdot \vec{R}$  pelo  $\vec{R} \cdot \vec{P}$ , temos,

$$\begin{aligned} -2i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi &= -2i(\vec{R} \cdot \vec{P} - 3i) \frac{1}{R} \psi \\ &= -2i\vec{R} \cdot \vec{P} \frac{1}{R} \psi - \frac{6}{R} \psi \\ &= -2i\vec{R} \cdot (-i\vec{\nabla}) \frac{1}{R} \psi - \frac{6}{R} \psi \\ &= -2i\vec{R} \cdot (-i) \left\{ \frac{1}{R} \vec{\nabla} \psi + \psi \vec{\nabla} \left( \frac{1}{R} \right) \right\} - \frac{6}{R} \psi \\ &= -2i\vec{R} \cdot \left\{ \frac{1}{R} \vec{P} \psi + \frac{i}{R^2} \hat{R} \psi \right\} - \frac{6}{R} \psi \\ &= -\frac{2i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} \psi + \frac{2}{R^3} \vec{R} \cdot \vec{R} \psi - \frac{6}{R} \psi, \end{aligned} \tag{151}$$

onde fizemos a substituição  $\hat{R} = \frac{\vec{R}}{R}$ . Considerando então que  $\vec{R} \cdot \vec{R} = R^2$  e simplificando, chegamos ao resultado para a primeira parcela,

$$-2i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi = -\frac{2i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} \psi - \frac{4}{R} \psi. \tag{152}$$

A segunda parcela é mais simples de avaliar. Usando novamente (136) temos,

$$\begin{aligned} (\vec{L} \times \vec{P}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi &= \vec{L} \cdot (\vec{P} \times \vec{R}) \frac{1}{R} \psi = -\vec{L} \cdot \vec{L} \frac{1}{R} \psi \\ &= -L^2 \frac{1}{R} \psi = -\frac{1}{R} L^2 \psi, \end{aligned} \tag{153}$$

onde usamos o fato que o operador  $L_i$  comuta com  $\frac{1}{R}$ , conforme mostramos no apêndice A (é simples mostrar que, utilizando o resultado (103),  $L^2$  também comuta). Reunindo então (152) e (153), temos finalmente o resultado para o 7º termo,

$$-(\vec{P} \times \vec{L}) \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi = -\left( \frac{1}{R} L^2 + \frac{2i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} + \frac{4}{R} \right) \psi. \tag{154}$$

**8º termo:**  $i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi$

Utilizando novamente  $[\vec{R}, \vec{P}] = 3i$  para trocar o produto  $\vec{P} \cdot \vec{R}$  por  $\vec{R} \cdot \vec{P}$ , temos então,

$$\begin{aligned} i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi &= i(\vec{R} \cdot \vec{P} - 3i) \frac{1}{R} \psi \\ &= i\vec{R} \cdot \vec{P} \frac{1}{R} \psi + \frac{3}{R} \psi, \end{aligned} \tag{155}$$

a parcela  $i\vec{R} \cdot \vec{P} \frac{1}{R} \psi$  pode ser determinada usando o mesmo procedimento empregado no cálculo da primeira parcela do 7º termo. Logo,

$$i\vec{R} \cdot \vec{P} \frac{1}{R} \psi = \frac{i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} \psi - \frac{1}{R} \psi, \tag{156}$$

colocando (156) em (155) e simplificando, temos o resultado para o 8º termo,

$$i\vec{P} \cdot \vec{R} \frac{1}{R} \psi = \left( \frac{i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} + \frac{2}{R} \right) \psi. \tag{157}$$

**9º termo:**  $\frac{1}{R^2} \vec{R} \cdot \vec{R} \psi$

O cálculo deste último termo é bem direto. O resultado simplesmente é,

$$\frac{1}{R^2} \vec{R} \cdot \vec{R} \psi = \frac{1}{R^2} R^2 \psi = \psi, \tag{158}$$

por fim, desconsiderando o estado  $\psi$  e reunindo todos esses nove resultados em (140), temos,

$$\begin{aligned} A^2 &= P^2 L^2 + 0 - \frac{1}{R} L^2 + 2P^2 - P^2 + \frac{i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} - \frac{1}{R} L^2 \\ &\quad - \frac{2i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} - \frac{4}{R} + \frac{i}{R} \vec{R} \cdot \vec{P} + \frac{2}{R} + 1 \\ &= 2 \left( \frac{P^2}{2} - \frac{1}{R} \right) L^2 + 2 \left( \frac{P^2}{2} - \frac{1}{R} \right) + 1, \end{aligned} \tag{159}$$

como a expressão dentro dos parênteses é exatamente o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio não-relativístico (59), chegamos então ao resultado final do apêndice,

$$A^2 = 2H (L^2 + 1) + 1. \tag{160}$$

## Referências

- [1] L.M. Malard, M.H.D. Guimarães, D.L. Mafra, M.S.C. Mazzoni e A. Jorio, Phys. Rev. B. **79**, 125426 (2009).
- [2] D. Harlow e H. Ooguri, Commun. Math. Phys. **383**, 1669 (2021).
- [3] M.M. Anber, S. Hong e M. Son, J. High Energ. Phys. **2022**, 62 (2022).
- [4] G. Kanwar, M.S. Albergo, D. Boyda, K. Cranmer, D.C. Hackett, S. Racanière, D.J. Rezende e P.E. Shanahan, Phys. Rev. Lett. **125**, 121601 (2020).
- [5] J.G.F. Belinfante, J. Math. Phys. **12**, 1041 (1971).

- [6] D.I. Kazakov, *Phys.-Usp.* **62**, 364 (2019).
- [7] S.U. Mamatha, R.L.V.R. Devi, N.A. Ahammad, N.A. Shah, B.M. Rao, C.S.K. Raju, M.I. Khan e K. Guedri, *Int. J. of Modern Phys. B* **37**, 2350007 (2023).
- [8] E. Marsch e Y. Narita, *Eur. Phys. J. Plus* **135**, 782 (2020).
- [9] Z. Qiao e R. Dick, *J. Phys. Commun.* **3**, 075008 (2019).
- [10] A. Antinucci, G. Galati e G. Rizi, *J. High Energ. Phys.* **2022**, 61 (2022).
- [11] M.E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 653 (1998).
- [12] A. Mock, *Opt. Express* **24**, 22693 (2016).
- [13] E.A. Calzetta, B.L. Hu e F.D. Mazzitelli, *Phys. Rep.* **352**, 459 (2001).
- [14] S. Gielen e A. Polaczek, *Class. Quantum Grav.* **37**, 165004 (2020).
- [15] G. Calcagni, S. Gielen e D. Oriti, *Class. Quantum Grav.* **29**, 105005 (2012).
- [16] J.M.F. Bassalo e M.S.D. Cattani, *Teoria dos Grupos* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2008), 2 ed.
- [17] K. Tapp, *Matrix Groups for Undergraduates* (American Mathematical Society, Providence, 2005), v. 29.
- [18] B.L. Soares, *Simetrias Globais e Locais em Teorias de Calibre*. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, São Paulo (2007).
- [19] E. Noether, *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, Math.-Phys.* **K1**, 235 (1918).
- [20] N. Lemos, *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007), 2 ed.
- [21] J. Furtado e J.A. Helayël-Neto, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **43**, e20200338 (2021).
- [22] K. Moriyasu, *An Elementary Primer for Gauge Theory* (World Scientific Publishing, Singapore, 1983).
- [23] A. Gonçalves, *Introdução à Álgebra* (IMPA, Rio de Janeiro, 2015), 5 ed.
- [24] L.S. Martin, *Grupos de Lie* (Editora da Unicamp, Campinas, 2017).
- [25] A. Ceulemans e P.W. Fowler, *Phys. Rev. A* **39**, 481 (1989).
- [26] Z. Dun, W. Shun-Jin e L. Hong-Gang, *Commun. Theor. Phys.* **50**, 63 (2008).
- [27] D. Podolsky, E. Altman, T. Rostunov e E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 246402 (2004).
- [28] M. Bander e C. Itzykson, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 330 (1966).
- [29] A.Z. de Oliveira, *Simetria Dinâmica na Mecânica Quântica*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória (2014).
- [30] B. Lesche, *Teoria da Relatividade* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [31] A.N. Rocha, B.F. Rizzuti e D.S. Mota, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **35**, 4304 (2013).
- [32] I. Newton, *Philosophia Naturalis Principia Mathematica* (Royal Society, London, 1687).
- [33] W. Pauli, *Z. Phys.* **36**, 336 (1926).
- [34] E.L. Lima, *Variedades Diferenciáveis* (IMPA, Rio de Janeiro, 2007).
- [35] B. Hall, *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations – An Elementary Introduction* (Springer, London, 2015).
- [36] C. Isham, *Modern Differential Geometry for Physicists* (World Scientific Publishing, Singapore, 2001).
- [37] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics* (IOP Publishing, London, 2003), 2 ed.
- [38] R. Gilmore, *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications* (John Wiley & Sons, New York, 1974).
- [39] B.G. Wybourne, *Classical Groups for Physicists* (John Wiley & Sons, New York, 1974), 1 ed.
- [40] L.W. Tu, *Differential Geometry - Connections, Curvature, and Characteristic Classes* (Springer, Cham, 2017).
- [41] L.M. Abreu, A.E. Santana, E.E. Santos e A. Ribeiro Filho, *Sitientibus Série Ciências Físicas* **5**, 26 (2009).
- [42] G. Galilei, *Dialogue Concerning the Two New Sciences* (Dover, New York, 2015).
- [43] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1994).
- [44] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, Paris, 1977), v. 1.