

LA VIDA SECRETA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

MIROSLAVA MOSSO, SERGIO NIETO

RESUMEN. Nuestro trabajo es sobre cómo encontrar el espectro de energía de todos los estados ligados del átomo de hidrógeno en el caso **no-relativista** y su degeneración, todo basándonos únicamente en consideraciones sobre la *simetría* del problema.

1. INTRODUCCIÓN

Siempre que se tengan dos partículas en interacción dentro de un campo central en el espacio euclideo en $3D$ sin considerar términos relativistas, se tendrá conservación de energía, momento y momento angular. Sin embargo, cuando la fuerza va como $1/r^2$ hay una cantidad conservada extra. Esta se conoce como **Vector de Runge-Lenz**, inicialmente descubierto por Laplace. Su existencia se puede ver a partir del hecho que en el problema gravitacional de 2 cuerpos, cada partícula orbita alrededor del centro de masa en una elipse (o parábola o hipérbola) cuyo *perihelio no cambia con el tiempo*. El vector de Runge-Lenz apunta en la dirección del perihelio. Si se modificase ligeramente la potencia a $1/r^{2+\epsilon}$ con $0 < \epsilon < 1$, la órbita quizá seguiría siendo elíptica, pero el perihelio presentaría precesión.

Brevemente, el vector de Runge-Lenz no solo se conserva clásicamente, sino *también a nivel cuántico*. El principal ejemplo es *el átomo de hidrógeno*. La sorpresa es que la degeneración de los niveles de energía es inherente a la ley del cuadrado inverso y se debe precisamente a la conservación del vector de Runge-Lenz.

2. LA SIMETRÍA A NIVEL CLÁSICO

2.1. Fuerzas centrales. Consideremos un sistema de 2 cuerpos, bajo el efecto de una fuerza dirigida a lo largo de la línea que conecta el centro de masa de ambos cuerpos [Fig. 1]. Esta descripción del sistema resulta ser de gran importancia física debido a que muchas fuerzas en la naturaleza son centrales [2].

Para describir el sistema de 2 cuerpos requerimos de un vector \vec{r}_1 que localice a la masa m_1 , un vector \vec{r}_2 que localice a m_2 y un vector \vec{r} que localice al centro de masa del sistema.

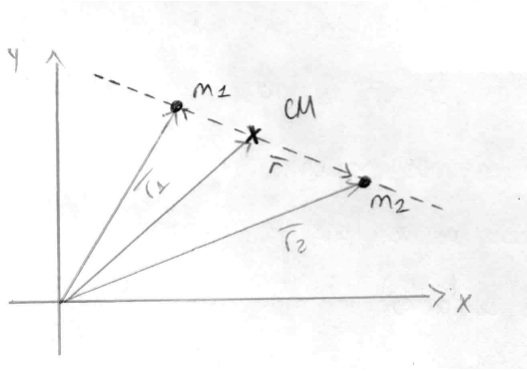


FIGURA 1. Sistema de dos masas que interactúan mediante una fuerza central.

La función lagrangiana del sistema sería:

$$(2.1) \quad L = \frac{1}{2}m_1(\dot{\vec{r}}_1)^2 + \frac{1}{2}m_2(\dot{\vec{r}}_2)^2 - V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Pero para simplificar el problema nos posicionamos en el centro de masa del sistema y tomamos este punto como el origen del sistema. Entonces, nuestra función lagrangiana nos quedará como:

$$(2.2) \quad L = \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})$$

En donde μ es la masa reducida, dada por $\mu = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)}$. Así, habremos reducido el problema original de 2 masas a un problema equivalente de una sola partícula de masa μ .

Notemos que el potencial depende solo de \vec{r} , es decir la rotación del sistema se hace con respecto a un eje fijo en el origen, por esta razón el sistema posee simetría esférica y es invariante bajo rotaciones $SO(3)$.

El teorema de Noether nos dice que asociada a esta simetría tendremos una cantidad física que se conserva. Para ver esto, expresamos nuestro lagrangiano en coordenadas polares:

$$(2.3) \quad L = \frac{1}{2}\mu[(\dot{\vec{r}})^2 + r\dot{\theta}^2] - V(\vec{r})$$

Las ecuaciones de Euler-Lagrange para la coordenada θ nos dan lo siguiente:

$$(2.4) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - \frac{\partial L}{\partial \theta} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - \frac{\partial L}{\partial \theta} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} &= 0 \\ \frac{d}{dt} P_\theta &= 0 \\ P_\theta &= cte \end{aligned}$$

En donde hemos definido el momento generalizado asociado a la coordenada θ como $P_\theta = \mu r^2 \dot{\theta}$. Por el resultado anterior lo que podemos decir es que este momento asociado a transformaciones angulares, llamado *momento angular*, se conserva.

Como podemos ver, esta es una característica de cualquier problema de fuerza central: la simetría $SO(3)$ implica una cantidad conservada: el momento angular.

2.2. El problema de Kepler. Cuando los dos cuerpos interactúan por medio de una fuerza central que varía como $\frac{1}{r^2}$ el problema de

fuerza central se conoce como *problema de Kepler*. La solución en este caso se puede deducir a partir de la conservación del momento angular:

$$(2.5) \quad L = \mu r^2 \frac{d\theta}{dt}$$

Usando esta ecuación podemos poner a θ en función del radio. También usamos la otra cantidad conservada del problema que es la energía E e integrando obtenemos:

$$(2.6) \quad \theta(r) - \theta_0 = \int \frac{(\frac{L}{\mu})ds}{\sqrt{\frac{2}{\mu}(E - \frac{L^2 s^2}{2\mu} + ks)}}$$

Esta se puede pasar a una integral trigonométrica y podemos encontrar la solución que nos define la forma de sección cónica de la órbita de nuestro sistema:

$$(2.7) \quad r = \frac{c}{\epsilon \cos(\theta - \theta_0) + 1}$$

En donde definimos la excentricidad ϵ que se encuentra en términos de la energía total del sistema:

$$(2.8) \quad \epsilon = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2}}$$

Entonces, para distintos valores de ϵ tenemos:

1) Circunferencias:

$$\begin{aligned} \epsilon &= 0 \\ 1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2} &= 0 \\ \Rightarrow E &= \frac{-\mu k^2}{2L^2} \end{aligned}$$

2) Elipses:

$$\begin{aligned} 0 < \epsilon < 1 \\ 1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2} < 1 \\ \Rightarrow E < 0 \end{aligned}$$

3) Parábolas:

$$\begin{aligned} \epsilon &= 1 \\ 1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2} &= 1 \\ \Rightarrow E &= 0 \end{aligned}$$

4) Hipérbolas:

$$\begin{aligned} \epsilon &= 1 \\ 1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2} &> 1 \\ \Rightarrow E &> 0 \end{aligned}$$

2.3. Vector de Laplace-Runge-Lenz. En el problema de Kepler (que la fuerza sea proporcional a $1/r^2$) se distingue la existencia de un vector conservado extra, uno más, a parte de los que ya hemos mencionado. Comencemos con la descripción de una fuerza central en la forma:

$$\begin{aligned} \dot{\vec{p}} &= f(r)\hat{r} \\ \dot{\vec{p}} &= \frac{\vec{r}}{|r|} \end{aligned}$$

En donde $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$. Tomando producto cruz:

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= \frac{f(r)}{r} \vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{p}) \\
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= \frac{f(r)}{r} m [\vec{r} \times (\vec{r} \times \dot{\vec{r}})] \\
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= \frac{f(r)}{r} m [\vec{r}(\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}}) - \dot{\vec{r}}(\vec{r} \cdot \vec{r})]
\end{aligned}$$

Donde usamos la identidad:

$$(2.9) \quad a \times (b \times c) = b(a \cdot c) - c(a \cdot b)$$

Y usamos también el hecho de que:

$$(2.10) \quad \vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\vec{r} \cdot \vec{r}) = r\dot{r}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= \frac{mf(r)}{r} [\vec{r}r\dot{r} - \dot{\vec{r}}r^2] \\
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= \frac{mf(r)}{r} \left[\frac{r^2 r \dot{\vec{r}}}{r^2} - \frac{r^3 \dot{\vec{r}}}{r} \right] \\
\dot{\vec{p}} \times \vec{L} &= mf(r)r^2 \left[\frac{\dot{\vec{r}}}{r^2} \vec{r} - \frac{\dot{\vec{r}}}{r} \right]
\end{aligned}$$

Por otro lado, podemos expresar a $\dot{\vec{p}} \times \vec{L} = \frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L})$ y tener que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L}) &= mf(r)r^2 \left(\frac{\dot{\vec{r}}}{r^2} - \frac{\dot{\vec{r}}}{r} \right) \\
\frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L}) &= -mf(r)r^2 \frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{r}}{r} \right)
\end{aligned}$$

Como en el problema de Kepler usamos una fuerza $f(r) = \frac{-k}{r^2}$, entonces

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L}) &= \frac{kmr^2}{r^2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) \\
\frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L}) - \frac{d}{dt}\left(mk\frac{\vec{r}}{r}\right) &= 0 \\
\frac{d}{dt}(\vec{p} \times \vec{L} - mk\frac{\vec{r}}{r}) &= 0 \\
(\vec{p} \times \vec{L} - mk\frac{\vec{r}}{r}) &= cte
\end{aligned}$$

Por lo tanto, el vector siguiente se conserva:

$$(2.11) \quad \vec{A} = \vec{p} \times \vec{L} - mk\hat{r}$$

Este se conoce como el vector de **Laplace-Runge-Lenz**, el cual es una cantidad conservada adicional para el problema de Kepler. En particular, por ser una constante de movimiento, siempre estará apuntando en una misma dirección. Ahora, la proyección del vector \vec{A} en la dirección radial nos debe dar información completa sobre la órbita:

$$\vec{A} \cdot \vec{r} = \cos^{-1} \theta$$

por otro lado,

$$\begin{aligned}
\vec{A} \cdot \vec{r} &= \vec{r} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) - mkr \\
\vec{A} \cdot \vec{r} &= \vec{L} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) - mkr \\
\vec{A} \cdot \vec{r} &= \vec{L} \cdot \vec{L} - mkr \\
\vec{A} \cdot \vec{r} &= L^2 - mkr \\
\Rightarrow \cos^{-1} \theta &= L^2 - mkr
\end{aligned}$$

Despejamos a r en función de θ y obtenemos:

$$(2.12) \quad r(\theta) = \frac{L^2}{mk(1 + \frac{A}{mk} \cos \theta)}$$

Observamos que esta es casi la solución para el problema de Kepler, solo con otros parámetros. De hecho, en la que se obtuvo anteriormente

se encuentra \vec{A} nuestro sistema se encuentra rotado, tal que $\theta_0 = 0$, es decir, en este sistema θ es 0 justo en el perihelio de la órbita. Comparando los términos de las ecuaciones anteriores llegamos a que $\epsilon = A$. Por lo tanto, la magnitud del vector de Runge-Lenz es la excentricidad de la órbita y además éste vector siempre apunta en una misma dirección, la dirección del perihelio de la órbita.

3. EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

Supongamos que el átomo de hidrógeno lo podemos ver como un sistema de dos partículas que interactúan por medio de una fuerza central: la fuerza de Coulomb [5]. Es un hecho experimental que es también es proporcional a $\frac{1}{r^2}$, se trata de una fuerza central entre el protón y el electrón.

Para el átomo de hidrógeno el hamiltoniano del sistema es:

$$(3.1) \quad \mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} - \frac{k}{r}$$

en donde $k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$, y lo que buscamos son los eigenestados para este operador.

Motivados en la conservación del vector de Runge-Lenz clásico, definimos un vector de Runge-Lenz cuántico, ahora operador, y lo definimos como un operador hermitiano a partir del siguiente vector simetrizado:

$$(3.2) \quad \vec{A} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} \times \vec{L} + \vec{L} \times \vec{p}) - k \frac{\vec{r}}{r}$$

entonces, las componentes del vector de Runge-Lenz que usaremos como operador serán:

$$(3.3) \quad A_i = \frac{\epsilon_{ijk}}{2\mu} \{P_j, L_k\} - kr_i$$

En donde ahora P_i , L_i y r_i son los operadores hermitianos para el momento angular y la posición, respectivamente.

Cabe destacar que \mathbf{P} y \mathbf{L} no conmutan, por ello se simetrizó el operador que se obtiene de ambos en la expresión del vector de Runge-Lenz, para así obtener un operador hermitiano \mathbf{A} que conmute con \mathbf{H} .

Las relaciones de conmutación del hamiltoniano con los operadores \mathbf{L} y \mathbf{A} son las siguientes [6]:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, L_i] &= 0 \\ [\mathbf{H}, A_i] &= 0 \\ [L_i, L_j] &= i \epsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, A_j] &= i \epsilon_{ijk} A_k \\ [A_i, A_j] &= -i \epsilon_{ijk} L_k \frac{2E}{\mu} \end{aligned}$$

Las dos primeras reglas de conmutación anteriores nos dicen que \mathbf{L} y \mathbf{A} son cantidades conservadas ya que conmutan con \mathbf{H} .

Ahora supongamos que existe un estado ligado, i.e., por definición, un estado con energía $E < 0$, que como vimos en el problema de Kepler, corresponden clásicamente a órbitas elípticas. Los eigenvalores de \mathbf{H} que se obtienen son los siguientes (restableciendo unidades):

$$E_n = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\mu e^2}{2n^2 \hbar^2}$$

En la siguiente sección explicaremos estos valores que son debido a la simetría *escondida* [4] que tiene nuestro problema debida a la existencia del vector de Runge-Lenz.

4. LA SIMETRÍA A NIVEL CUÁNTICO

La conservación del momento angular es consecuencia de la simetría bajo rotaciones que tiene el problema, es una simetría bajo el grupo $SO(3)$. Cualquier problema de fuerza central tiene esta simetría. El punto es que el problema de la ley de cuadrado inverso realmente tiene una simetría bajo un grupo más grande, $SO(4)$ (o $SO(3, 1)$ para estados no-ligados).

$SO(4)$ es el grupo de rotaciones en 4D. Este grupo es de dimensión 6, por lo que corresponderá, debido al teorema de Noether, a 6 cantidades conservadas: usaremos las 3 componentes de \mathbf{L} y las 3 componentes de \mathbf{K} , que es una versión normalizada del vector de Runge-Lenz:

$$(4.1) \quad \mathbf{K} = k \sqrt{\frac{m}{2|H|}} \mathbf{A}$$

Este vector se conserva a nivel cuántico porque \mathbf{H} y \mathbf{A} se conservan también a nivel cuántico [6].

Sabemos ya que

$$(4.2) \quad \begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\epsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk} K_k \\ [K_i, K_j] &= \pm i\epsilon_{ijk} K_k \end{aligned}$$

donde el signo es $+$ si la energía es negativa y $-$ si es positiva. Esto significa que si nos restringimos al conjunto de puntos:

$$(4.3) \quad X_- = \{(q, p) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 : H(q, p) < 0\}$$

obtendremos las ecuaciones con el signo positivo, y estas son precisamente las relaciones de conmutación que cumple el bracket de Lie para el álgebra $so(4)$. Si luego nos restringimos a:

$$(4.4) \quad X_+ = \{(q, p) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 : H(q, p) > 0\}$$

obtendremos las ecuaciones con el signo negativo, y estas nos dan las relaciones para el bracket de Lie en $so(3, 1)$.

Ahora el programa *cuántico* es el siguiente:

1. Usando el vector de Runge-Lenz, probar que las componentes de \mathbf{L} y \mathbf{A} generan efectivamente un álgebra de Lie isomorfa a la de $SO(4)$.
2. Mostrar que esta álgebra asociada a $SO(4)$ es en realidad isomorfa a la de $SU(2) \times SU(2)$, es decir, dos copias del álgebra usual de $SU(2)$ (mutuamente conmutativas).
3. Encontrar de alguna manera y a partir de esta información la degeneración de los niveles de energía permitidos en el problema.

Solución

Iniciamos con el enunciado principal *no-conmutativo* de la Mecánica Cuántica:

$$(4.5) \quad [x_i, p_j] = i\delta_{ij}$$

de donde se sigue que $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$. Con esto tenemos también que los conmutadores $[L_i, \mathbf{H}] = 0$, debido a que \mathbf{H} es un invariante escalar bajo rotaciones y, por tanto, conmuta con cada componente L_i .

Para el vector RL hay, ya vimos que hay una ambigüedad en el orden, inicialmente el vector RL es proporcional a \mathbf{P} y este no conmuta con el hamiltoniano. Para lograr que conmute es suficiente simetrizar el operador y trabajar con una versión modificada del vector de RL:

$$\begin{aligned}
(4.6) \quad \vec{A} &= \frac{1}{2mk}(\vec{L} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{L}) + \frac{\vec{x}}{r} \\
&= \frac{1}{2mk}\epsilon_{ijk}\{L_i, p_j\} + \frac{\vec{x}}{r}
\end{aligned}$$

De esta forma tenemos que $[A_i, H] = 0$, y también podemos calcular que $[L_i, A_i] = i\epsilon_{ijk}A_k$. El conmutador de dos componentes del vector de RL es algo mucho más complicado. El resultado es [6]:

$$(4.7) \quad [A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk}L_k \frac{-2H}{mk^2}$$

Esto nos permite definir las componentes de \mathbf{K} :

$$(4.8) \quad \mathbf{K} = k\sqrt{\frac{m}{2|\mathbf{H}|}}\mathbf{A}$$

donde ya hemos hecho la elección de signo para generar el álgebra que buscamos. Físicamente esta fórmula solo es válida para estados ligados. El otro signo representa que el átomo está esencialmente ionizado (trayectorias de dispersión) y el electrón es libre, dando lugar a un espectro continuo.

Ahora nos debemos fijar únicamente en un solo nivel de eigenestados que son propios para \mathbf{H} y que tienen el mismo eigenvalor. En este subespacio del espacio de Hilbert total, \mathbf{H} puede reemplazarse por el eigenvalor elegido. De esta forma, usaremos las 3 componentes de \mathbf{L} y las 3 de \mathbf{K} y llegamos al álgebra de $\text{SO}(4)$ que ya habíamos definido antes:

$$\begin{aligned}
(4.9) \quad [L_i, L_j] &= i\epsilon_{ijk}L_k \\
[L_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk}K_k \\
[K_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk}K_k
\end{aligned}$$

Ahora, vamos a construir los generadores siguientes que nos ayudarán a resolver el problema de la degeneración:

$$(4.10) \quad M_i = \alpha L_i + \beta A_i, \quad N_i = \alpha L_i - \beta A_i$$

y el requerimiento de que generen dos copias que conmutan entre sí $[M_i, N_j] = 0$ significa que los coeficientes deben cumplir:

$$(4.11) \quad \beta = \alpha \sqrt{\frac{-mk^2}{2E}}$$

El otro signo solo nos lleva a intercambiar el papel de M_i y N_i y no nos lleva a nuevas soluciones físicas. Con $\alpha = 1/2$ tenemos la normalización usual de los conmutadores:

$$(4.12) \quad \begin{aligned} [M_i, M_j] &= i\epsilon_{ijk} M_k, \\ [N_i, N_j] &= i\epsilon_{ijk} N_k \end{aligned}$$

con esto precisamente vemos que generan el álgebra asociada a $SU(2) \times SU(2)$. Ahora, lo importante es darse cuenta de que:

$$(4.13) \quad M^2 = N^2$$

Y esto es cierto porque la diferencia $M^2 - N^2$ es proporcional a la parte hermitiana de $L\dot{A}$ y esta es cero. De esta forma, sabemos ya que los valores propios permitidos $m^2 = n^2$ son cualquier número de la forma:

$$(4.14) \quad m^2 = n^2 = j(j+1), \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

y el correspondiente nivel de energía debe transformar como (j, j) (en la notación que indica los spines) bajo $SU(2) \times SU(2)$. Así, introducimos la degeneración ordinaria de un multiplete de spin j de $SU(2)$:

$$(4.15) \quad n = 2j + 1, \quad n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

Aquí podemos ver la degeneración de un nivel dado como $(2j+1)^2 = n^2$, esto es así porque cada $SU(2)$ contribuye con el mismo factor de n a

la degeneración del producto tensorial de sus representaciones de spin j .

Una pregunta que nos quedaría por responder es si estos estados existen del todo para todos los enteros positivos n . La representación de dimensión (n, n) es de hecho real porque es el producto tensorial de dos representaciones reales (para j entero), o de dos pseudo-reales representaciones (para j semi-entero).

Nos falta saber la energía de este estado ligado con degeneración n^2 . Esto se obtiene de la identidad:

$$(4.16) \quad E(L^2 + 1) = \frac{mk^2}{2}(A^2 - 1)$$

la cual es más directa de probar si se escribe

$$(4.17) \quad M^2 = j(j+1) = \frac{n-1}{2} \frac{n+1}{2} = \frac{n^2 - 1}{4}$$

y podemos ver que $M^2 + 1/4$ es igual $n^2/4$ y la fórmula entre M y E nos dice que

$$(4.18) \quad E = -\frac{mk^2}{2n^2}$$

que es la energía correcta para el estado ligado del átomo de hidrógeno con número cuántico principal n . En unidades normales SI, lo que tenemos es

$$(4.19) \quad k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}, \quad E = -\frac{m}{2n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 = -\frac{13,6eV}{n^2}$$

5. $\text{SO}(4) \cong \text{SU}(2) \times \text{SU}(2)$

Un mapeo lineal preserva la orientación si su determinante es positivo. Una rotación en \mathbb{R}^n alrededor de un punto O precisamente se define como una isometría que preserva orientación y que deja fijo el punto O . Es muy interesante notar [1] que esto quiere decir que cualquier rotación, en nuestro ejemplo \mathbb{R}^4 , es producto de un número finito de reflexiones: 0, 2, 4.

Podemos usar los cuaterniones \mathbb{H} para generar toda rotación en \mathbb{R}^4 [1]. Primero veamos que podemos hacer una reflexión.

Una reflexión en el hiperplano que pasa por O ortogonal al cuaternion unitario u la vamos a definir como el mapeo que manda $q \in \mathbb{H}$ al elemento $-u\bar{q}u$.

- Este mapeo es una isometría. Esto es porque $q \mapsto -\bar{q}$ revierte la parte real de q y mantiene la parte imaginaria fija. Luego, es una reflexión en el hiperplano generado por \mathbf{i}, \mathbf{j} y \mathbf{k} .
- Multiplicar por la izquierda por el cuaternion unitario u es una isometría ya que \mathbb{H} es un álgebra de división y esto implica que $|uq_1 - uq_2| = |u||q_1 - q_2| = |q_1 - q_2|$.

Ahora, podemos ver que este mapeo hace lo siguiente:

$$(5.1) \quad \begin{aligned} vu &\mapsto -u\overline{(vu)}u = -u\bar{v}\bar{u}u \\ &= -\bar{v}u \end{aligned}$$

ya que u es unitario. Y en particular, el mapeo manda u en $-u$, de tal manera que vectores paralelos a u se revierten. También, tenemos que $\mathbf{i}u, \mathbf{j}u$ y $\mathbf{k}u$ quedan fijos. Y justo estos vectores son los que generan el hiperplano ortogonal a u .

Entonces, el mapeo $q \mapsto -u\bar{q}u$ es realmente una reflexión.

De esta forma tenemos que *cualquier rotación en $\mathbb{H} = \mathbb{R}^4$ alrededor de O es un mapeo de la forma $q \mapsto vqw$, donde v y w son cuaterniones.*

Inversamente, cualquier mapeo de esta forma es una rotación debido a que multiplicar por ambos lados por un cuaternion es una isometría que preserva la orientación. Para ver esto, escribimos el cuaternion unitario en la forma:

$$(5.2) \quad v = \begin{pmatrix} a + id & -b - ic \\ b - ic & a - id \end{pmatrix}$$

donde $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$. Multiplicar por este cuaternion es una transformación lineal en \mathbb{R}^4 y por bloques esta transformación define una matriz de determinante 1.

5.1. $SO(4) \cong SU(2) \times SU(2)$. Para un cuaternion unitario v se tiene que también v^{-1} es unitario. Por lo que podemos escribir cualquier rotación también como $q \mapsto v^{-1}qw$.

Pares de cuaterniones (v, w) forman un grupo bajo la operación definida por:

$$(5.3) \quad (v_1, w_1)(v_2, w_2) = (v_1v_2, w_1w_2),$$

donde los productos v_1v_2 y w_1w_2 a la derecha son los productos ordinarios de cuaterniones. Ya que el elemento v viene del grupo de cuaterniones unitarios $SU(2)$ y también el elemento w , lo que tenemos es el producto directo $SU(2) \times SU(2)$.

El mapeo que manda a cada par $(v, w) \in SU(2) \times SU(2)$ a la rotación $q \mapsto v^{-1}qw$ en $SO(4)$ es un homomorfismo $\phi : SU(2) \times SU(2) \rightarrow SO(4)$.

Esto es porque el producto del mapeo $q \mapsto v_1^{-1}qw_1$ correspondiente a (v_1, w_1) con el mapeo $q \mapsto v_2^{-1}qw_2$ correspondiente a (v_2, w_2) es el mapeo $q \mapsto v_2^{-1}v_1^{-1}qw_1w_2 = (v_1v_2)^{-1}q(w_1w_2)$.

Este homomorfismo es suprayectivo sobre $SO(4)$ ya que toda rotación es de esta forma. Pero podría todavía ser de muchos a uno. Lo que realmente se tiene es lo siguiente: *si (v, w) da cierta rotación, el único otro par que da la misma rotación es $(-v, -w)$.*

Para probar esto es suficiente probar que el kernel del homomorfismo $\phi : SU(2) \times SU(2) \rightarrow SO(4)$ tiene dos elementos.

Supongamos que (v, w) esta en el kernel, entonces $q \mapsto v^{-1}qw$ es la rotación identidad. en particular, esta rotación fija el 1, entonces

$$(5.4) \quad \begin{aligned} v^{-1}1w &= 1 \\ \Rightarrow v &= w \end{aligned}$$

Por lo que realmente tenemos el mapeo $q \mapsto v^{-1}qv$. Este mapeo fija el eje real y rota todo el espacio de cuaterniones puramente imaginarios. Solo en el caso en que $v = -1$ o $v = 1$ es que el mapeo fija todo tal y como la identidad. Entonces, el kernel de ϕ tiene solo dos elementos: $(1, 1)$ y $(-1, -1)$.

Las clases izquierdas del kernel son, por tanto, los conjuntos de 2 elementos:

$$(5.5) \quad (v, w)(\pm 1, \pm 1) = (\pm v, \pm w)$$

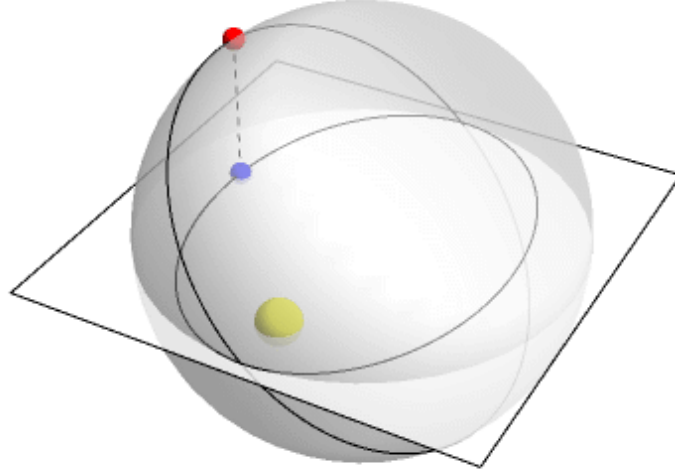
y cada clase corresponde a una rotación distinta de \mathbb{R}^4 . Tenemos lo siguiente:

$$SU(2) \times SU(2) /_{\ker \phi} \cong SO(4)$$

Lo que acabamos de mostrar es que $SO(4)$ es casi lo mismo que $SU(2) \times SU(2)$. De hecho, el subgrupo de pares $(v, 1)$ es no trivial y es subgrupo normal, claramente diferente de todo $SU(2) \times SU(2)$. Esto nos dice un hecho muy importante, $SO(4)$ *no es simple*.

6. CONCLUSIONES

El átomo de hidrógeno tiene entonces $(n+1)^2$ estados ligados asociados al mismo nivel de energía. Esto es, para el caso de una fuerza central que va como el cuadrado inverso hay estados de momento angular total



diferente que tienen la misma energía!

Una cosa que hemos aprendido es que las simetrías escondidas en el problema del átomo de hidrógeno se pueden ver desde distintas perspectivas.

Por mencionar un ejemplo, sin el problema del cuadrado inverso definimos una noción de tiempo diferente por medio de:

$$(6.1) \quad \frac{ds}{dt} = \frac{1}{r}$$

Este nuevo tiempo va más lento mientras nos alejamos mucho del centro y por tanto la partícula iría más rápido en este caso.

En el caso planetario esto quiere decir, que en este nuevo tiempo, para un planeta muy lejano del sol un día podría ser igual a una semana del tiempo ordinario.

Con este nuevo tiempo podemos hacer lo siguiente

$$(6.2) \quad t' = \frac{dt}{ds} = r$$

luego

$$(6.3) \quad \mathbf{r}' = \frac{d\mathbf{r}}{ds} = \frac{dt}{ds} \frac{d\mathbf{r}}{dt} = r \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

Usando esto se puede probar que la conservación de energía se puede escribir en la forma:

$$(6.4) \quad (t' - 1)^2 + \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' = 1$$

esta es la ecuación de una esfera en 4D.

Lo que estamos viendo que sucede es que, mientras el punto (t, x, y, z) se mueve en el espacio 4 dimensional mientras varía el parámetro s , la velocidad en este punto (t', x', y', z') se mueve sobre una esfera 4 dimensional! esta esfera esta centrada en el punto $(1, 0, 0, 0)$. Con un poco más de cálculos se puede ver que:

$$(6.5) \quad \begin{aligned} \mathbf{r}''' &= -\mathbf{r}' \\ t''' &= -(t' - 1) \end{aligned}$$

e integrando una vez de ambos lados en la primera ecuación:

$$(6.6) \quad \mathbf{r}'' = -\mathbf{r} + \mathbf{a}$$

lo que nos dice que la oscilación es armónica alrededor de un punto que permanece constante: \mathbf{a} . Como este punto es precisamente *una constante*, no va a cambiar con el tiempo: esencialmente recuperamos el vector de Runge-Lenz!

Podemos ver aquí que realmente **la vida secreta del átomo de hidrógeno** es que en 4D es el oscilador armónico!

El movimiento de este oscilador armónico es puramente circular, y justo, cuando es proyectado a 3 dimensiones lo que obtenemos es el movimiento en una sección cónica, que corresponde a elipses en el caso estudiado.

Esta observación sobrevive a la cuantización como ha sido mostrado en el trabajo que hemos presentado. El problema del átomo de hidrógeno nos muestra una relación muy interesante y profunda, lo que vemos es que el problema de Kepler y el oscilador armónico son, secretamente, el mismo problema.

REFERENCIAS

- [1] M. Berger, *Geometry:II*, Springer-Verlag, 1987.
- [2] J. José, E. Saletan, *Classical Dynamics: A contemporary approach*, Cambridge University Press, 1998.
- [3] J. Gôransson, *Symmetries of the Kepler problem* en <http://blogs.ams.org/visualinsight/2015/06/01/harmonic-orbit/>.
- [4] J. Milnor, *On the geometry of the Kepler problem*, *Amer. Math. Monthly*, **90** (1983).
- [5] S.F. Singer, *Linearity, symmetry and prediction in the hydrogen atom*, Springer, 2005.
- [6] A. Sudbery, *Quantum mechanics and the particles of nature: An outline for mathematicians*, Cambridge University Press, 1986.

FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM.

E-mail address: `miroslava.mosso@gmail.com`, `ssnieto@ciencias.unam.mx`