

Simetria oculta

Josep Planelles

16 de gener de 2022

1 Introducció

Com diu Gilmore, simetria implica degeneració.[1] Els estats degenerats són base de les representacions irreductibles del grup de transformacions G que deixa invariant l'Hamiltonià: $R_k \hat{H} R_k^{-1} = \hat{H}$, $R_k \in G$. En efecte, si anomenem Ψ_i a una funció pròpia d'aquest Hamiltonià i E_i a l'autovalor associat i definim $\Phi_k = R_k \Psi_i$, és senzill demostrar que Φ_k és també funció pròpia de $\hat{H}$ associada amb mateix valor propi E_i :

$$\hat{H} \Phi_k = R_k \hat{H} R_k^{-1} \Phi_k = R_k \hat{H} R_k^{-1} R_k \Psi_i = R_k \hat{H} \Psi_i = R_k E_i \Psi_i = E_i R_k \Psi_i = E_i \Phi_k$$

Aquest resultat és vàlid per a tots i cadascun dels elements R_k del grup de transformacions G que deixa invariant l'Hamiltonià. El conjunt de funcions pròpies degenerades $W = \{\Phi_k = R_k \Psi_i, \forall k\}$ expandeix un espai lineal estable sota G , és a dir, l'actuació de qualsevol $R_k \in G$ sobre una funció d'aquest espai genera una altra funció d'aquest espai, per tant una funció pròpia d' $\hat{H}$ associada amb el valor propi E_i . Diem llavors que qualsevol base d' W és també base d'una representació del grup G . I aquesta representació ha de ser irreductible, atès que d'altra manera no podríem generar *tot* l'espai W a partir de Ψ_i i l'aplicació de totes les $R_k \in G$. Per tant, *les representacions irreductibles de G ens proporcionen les degeneracions de l'espectre energètic del sistema.*

L'àtom d'hidrogen presenta un Hamiltonià equivalent al dels moviments planetaris al voltant del sol, i.e. energia cinètica més un potencial central inversament proporcional a la distància de la partícula a l'origen (el sol en el cas dels planetes, el nucli en el cas de l'hidrogen). Qualsevol rotació deixa invariant el mòdul del moment lineal, i per tant l'energia cinètica, i també la distància r al centre, i per tant l'energia potencial. En conseqüència deixa invariant l'Hamiltonià. Diem que el grup $SO(3)$ de rotacions en l'espai $\mathbb{R}^3$ és el grup de simetria de l'hidrogen. Els generadors de rotacions són precisament les components del moment angular, mentre que el quadrat del seu mòdul és l'invariant o operador de Casimir del grup, que commuta amb l'Hamiltonià i, com en els moviments planetaris, és una constant de moviment.

En mirar els orbitals però, observem per exemple que l'orbital $2s$ i l'orbital $2p$, tot i pertànyer a diferents irreps d' $SO(3)$, són degenerats. Per tant, si hi ha més degeneració que la que inclou $SO(3)$ vol dir que l'hidrogen té més simetria. Aquesta degeneració *accidental* ha de derivar d'alguna simetria *oculta*. Una primera indicació d'aquesta simetria *extra* ja la van identificar Laplace i Hamilton en estudiar òrbites planetàries.

La manera usual de determinar les òrbites estacionàries d'un potencial central és fer intervindre la conservació del moment angular $L = mr^2 \dot{\theta}$ i de l'energia $E = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r) = \frac{m \dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$. Des del moment angular deduïm $d\theta = \frac{L}{mr^2} dt$, amb L constant. De l'energia podem escriure $dr = f(r) dt$, i dividint una equació per l'altra trobem $\frac{d\theta}{dr} = g(r)$, cosa que permet integrar i obtenir $\theta = \theta_0 + \int g(r) dr$, que ens proporciona l'equació $\theta = \theta(r)$ de l'òrbita, que resulta ser el·líptica per a sistemes lligats ($E < 0$).

Laplace i Hamilton van seguir una altra via i en el camí van fer un descobriment: encara que amb la conservació del moment angular i l'energia se poden determinar completament les òrbites en un potencial central qualsevol, en el cas de potencials centrals inversament proporcionals a r , i.e., $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{k}{r^2}\mathbf{u}_r$ (coulòmbic o gravitacional), hi ha una magnitud addicional que també se conserva. Per tant en aquest problema hi ha simetries addicionals.

La via de Hamilton consisteix a multiplicar la segon llei de Newton vectorialment per $\mathbf{L}$:

$$\mathbf{L} \times \dot{\mathbf{p}} = -F(r) \mathbf{L} \times \mathbf{u}_r = -\frac{F(r)}{r} \mathbf{L} \times \mathbf{r} \quad (1)$$

Des de la identitat vectorial $A \times (B \times C) = B(A \cdot C) - C(A \cdot B)$ tenim que:

$$(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \times \mathbf{r} = -\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = r^2 \mathbf{p} - m \mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \quad (2)$$

Tanmateix, des de $\frac{d}{dt}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) = \frac{d}{dt} r^2$ tenim que $2\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} = 2r\dot{r}$, i.e. $\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} = r\dot{r}$.

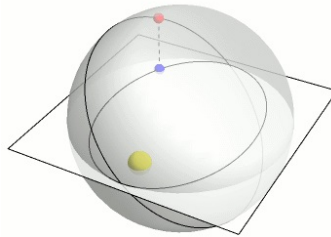
La constància del moment angular permet escriure $\frac{d}{dt}(\mathbf{L} \times \mathbf{p}) = \mathbf{L} \times \dot{\mathbf{p}}$. Aleshores, amb $F(r) = \frac{k}{r^2}$ i $\frac{d}{dt} \mathbf{r} = \frac{r\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{r}\dot{r}}{r^2} = \frac{1}{r}\dot{\mathbf{r}} - \frac{\dot{r}}{r^2} \mathbf{r}$ escrivim:

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{L} \times \mathbf{p}) = -\frac{k}{r^3}(r^2 \mathbf{p} - m \mathbf{r} r\dot{r}) = -k m \left(\frac{\dot{\mathbf{r}}}{r} - \frac{\dot{r}}{r^2} \mathbf{r} \right) = -k m \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{r}}{r} = -\frac{d}{dt} \left(k m \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \quad (3)$$

Per tant, $\frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - k m \frac{\mathbf{r}}{r}) = 0$, cosa que diu que el vector de dins del parèntesi $\mathbf{R} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - k m \frac{\mathbf{r}}{r}$, anomenat de Runge-Lenz, és una constant de moviment. Lligada amb aquest invariant ha d'haver una simetria (teorema de Noether).¹

En 1926 Pauli[2] va trobar l'espectre d'energies del problema de Kepler (àtom d'hidrogen) fent ús de la conservació dels vectors de Runge-Lenz i el moment angular. Un poc més tard, Fock[3] va explicar la degeneració dels nivells d'energia en termes de l'àlgebra d'un grup isomorf al de rotacions en quatre dimensions $SO(4)$. D'on surt aquesta quarta dimensió? Donarem primer una resposta mecanoclàssica, abans de tornar sobre l'àtom quàntic.

Greg Egan[4] ens mostra aquesta imatge que suggereix la resposta. En la imatge, el plànol representa dues de les tres dimensions de $\mathbb{R}^3$. La direcció vertical és la *misteriosa* quarta dimensió.



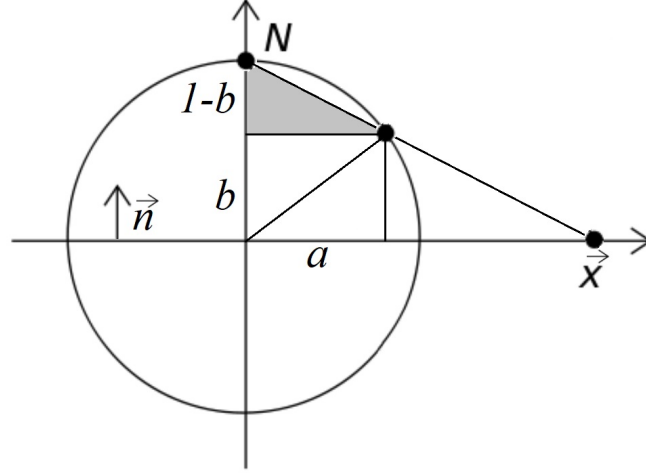
¹A partir del vector $\mathbf{R}$ podem determinar les òrbites:

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{r} - k m \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - k m r = \mathbf{L} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) - k m r = L^2 - k m r$$

Per tant $L^2 = k m r + \mathbf{R} \cdot \mathbf{u}_r$, $r = k m r + R r \cos \theta$ que podem reescriure $\frac{L^2}{k m} \frac{1}{r} = 1 + \frac{R}{k m} \cos \theta \equiv \frac{\ell}{r} = 1 + e \cos \theta$, que és l'equació d'una el·lipse amb origen al focus dret, escrita en coordenades polar (r, θ) .

2 La projecció estereogràfica de les òrbites de Kepler

Considerem una circumferència de radi unitat centrada a l'origen. La projecció $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ de $\mathbf{x}$ sobre la circumferència és el punt de tall d'aquesta amb la línia que uneix el seu pol nord amb $\mathbf{x}$ (vegeu la figura).



Com el radi és la unitat, $a^2 + b^2 = 1$. Tanmateix, la llei de proporcions del triangle ombrejat i el gran permet escriure: $\frac{x}{1} = \frac{a}{1-b}$. Per tant, $x = \frac{a}{1-b} \rightarrow x^2 = \frac{a^2}{(1-b)^2} = \frac{1-b^2}{(1-b)^2} = \frac{1+b}{1-b}$. Aïllant b trobem $b = \frac{x^2-1}{x^2+1}$ i per tant, $a = x(1-b) = x(1 - \frac{x^2-1}{x^2+1}) = \frac{2x}{x^2+1}$. En conseqüència la projecció resulta:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{2}{x^2+1} \mathbf{x} + \frac{x^2-1}{x^2+1} \mathbf{n} \quad (4)$$

amb $\mathbf{x} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ i $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

La generalització a $\mathbb{R}^4$ substitueix l'eix horitzontal per $\mathbb{R}^3$, contemplat aquest com un hiperplànol de $\mathbb{R}^4$, $\{(x_1, x_2, x_3, 0)^t \in \mathbb{R}^4\}$, el punt $\mathbf{x}$ pel vector $(x_1, x_2, x_3, 0)^t$ i el vector unitari perpendicular $\mathbf{n} = (0, 0, 0, 1)^t$. El punt $\mathbf{p}$ projectat sobre S^3 és:²

$$\mathbf{p} = \frac{2}{|\mathbf{x}|^2+1} \mathbf{x} + \frac{|\mathbf{x}|^2-1}{|\mathbf{x}|^2+1} \mathbf{n}. \quad (5)$$

En $\mathbb{R}^3$ $\mathbf{r}(t)$ és una el·lipse, però $\dot{\mathbf{r}}(t)$ i per tant $\mathbf{p}(t)$ és un cercle. En efecte, des de la definició de moment angular $L = I\omega = mr^2 \frac{d\theta}{dt}$ inferim que $\frac{1}{r^2} = \frac{m}{L} \frac{d\theta}{dt}$. Des de la llei de Newton, $m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V = \frac{k}{r^2} \mathbf{u}_r$. Dividint els dos resultats trobem que:

$$\frac{d\mathbf{v}}{d\theta} = \frac{k}{L} \mathbf{u}_r. \quad (6)$$

Els vectors unitaris en coordenades polars expressats en termes dels vectors unitaris en cartesianes són $\mathbf{u}_r = \cos \theta \mathbf{i} + \sin \theta \mathbf{j}$, $\mathbf{u}_\theta = -\sin \theta \mathbf{i} + \cos \theta \mathbf{j}$, tenint en compte aquestes relacions integrem l'eq. (6): $\int d\mathbf{v} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_0 = \frac{k}{L} \int \mathbf{u}_r d\theta = -\frac{k}{L} \mathbf{u}_\theta$

$$\rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{v}_0 - \frac{k}{L} \mathbf{u}_\theta \quad (7)$$

²Una S^n esfera en $\mathbb{R}^{n+1}$ la formen el conjunt de punts $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n+1}$ amb coordenades $x_i, i = 1, 2, \dots, (n+1)$, tals que $\sum_{i=1}^{n+1} x_i^2 = 1$.

que elevat al quadrat dóna lloc a:

$$(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 = \frac{k^2}{L^2}, \quad (8)$$

equació que descriu un cercle de radi $\frac{k}{L}$ centrat en $\mathbf{v}_0$.³

Tot seguit mostrem que la projecció estereogràfica fa correspondre un cercle màxim de $S^2 \subset \mathbb{R}^3$ amb un cercle en el plànel $\mathbb{R}^2$ (d'igual manera, una esfera $S^3 \subset \mathbb{R}^4$ se correspon amb una esfera en $\mathbb{R}^3$).

Recordem que un cercle màxim és el conjunt de punts $\mathbf{p} = (x, y, h)^t$ del tall de S^2 amb un plànel que passa per l'origen, $Ax + By + Ch = 0$. Els valors x, y, h són la projecció de $\mathbf{P} = (X, Y)^t$ d'acord amb:

$$\mathbf{p} = \frac{2}{|\mathbf{P}|^2 + 1} \mathbf{P} + \frac{|\mathbf{P}|^2 - 1}{|\mathbf{P}|^2 + 1} \mathbf{n} \quad (9)$$

que, per components, proporciona les coordenades:

$$x = \frac{2X}{X^2 + Y^2 + 1}, \quad y = \frac{2Y}{X^2 + Y^2 + 1}, \quad h = \frac{X^2 + Y^2 - 1}{X^2 + Y^2 + 1} \quad (10)$$

que portades a l'equació del plànel resulta $2AX + 2BY + C(X^2 + Y^2 - 1) = 0$, i.e., $X^2 + Y^2 + \frac{2A}{C}X + \frac{2B}{C}Y = 1$ que reorganitzem en la forma:

$$\left(X + \frac{A}{C}\right)^2 + \left(Y + \frac{B}{C}\right)^2 = \frac{A^2 + B^2 + C^2}{C^2} \quad (11)$$

Per tant, qualsevol cercle $(X - X_0)^2 + (Y - Y_0)^2 = R^2$ en el plànel té una projecció en un cercle màxim de S^2 (que no és més que el tall de $S^2 : \{(x, y, h)^t / x^2 + y^2 + h^2 = 1\}$ amb el plànel $Ax + By + Ch = 0$). D'igual manera relacionem S^3 i $\mathbb{R}^3$.

Un cercle màxim d' S^n és una geodèsica en S^n (vegeu e.g. [5]), que és la trajectòria que segueix a velocitat constant una partícula lliure sobre S^n . En conseqüència, associada amb una òrbita Kepleriana en $\mathbb{R}^3$ hi ha una geodèsica en $S^3 \subset \mathbb{R}^4$. El moviment lliure en S^3 és invariant sota rotacions d' $\mathbb{R}^4$, grup $SO(4)$. Per tant, el moviment Keplerià associat també ho serà. $SO(4)$ conté el subgrup $SO(3)$ de les rotacions en l'espai $\mathbb{R}^3$, però també conté altres transformacions addicionals. Per això, a més de l'invariant moment angular, associat a $SO(3)$, presenta un segon invariant, el vector $\mathbf{R}$ de Runge-Lenz.⁴

3 Degeneracions associades amb el moviment lliure en S^n

En $\mathbb{R}^n$ l'operador nabla és: $\nabla_{\mathbb{R}^n}^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}\right)$. Aquest operador pot descompondre's de la següent manera:

$$\nabla_{\mathbb{R}^n}^2 = \frac{1}{r^{n-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{n-1} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \nabla_{S^{n-1}}^2$$

on $\nabla_{S^{n-1}}^2$ és un operador escrit en termes de coordenades angulars. És a dir, que actua sobre funcions derivables definides en S^{n-1} .

³Calculem $\mathbf{v}_0$: Des de l'eq. (7): $v_0^2 = v^2 + \frac{k^2}{L^2} + 2\frac{k}{L} \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_\theta$. Atès que $\mathbf{v} = \frac{dr}{dt} \mathbf{u}_r + r \frac{d\theta}{dt} \mathbf{u}_\theta$ tenim que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_\theta = r\dot{\theta}$ i per tant $\frac{k}{L} \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_\theta = \frac{kr\dot{\theta}}{mr^2\dot{\theta}} = \frac{k}{mr}$. En resum: $v_0^2 = \frac{k^2}{L^2} + \frac{2}{m} \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{k}{r}\right) = \frac{k^2}{L^2} + \frac{2E}{m} \rightarrow |\mathbf{v}_0| = \sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{k^2}{L^2}}$.

⁴ $SO(4)$, a més de les tres components del moment angular, compta amb les tres del vector de Runge-Lenz, de manera que $SO(4)$ té sis generadors de transformacions.

Per exemple: $\nabla_{\mathbb{R}^3}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$, $\nabla_{\mathbb{R}^2}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$.

Les solucions de l'equació de Laplace $-\nabla_{S^n}^2 f = \alpha f$,

1. Presenten autovalors $\alpha = \lambda(\lambda + n - 1)$, amb $\lambda = 0, 1, 2, \dots$

2. Presenten degeneració $\binom{\lambda + n}{\lambda} - \binom{\lambda + n - 2}{\lambda - 2}$

3. Presenten autofuncions $Y_{\lambda, q}^{(n)}$

Per exemple, en l'esfera S^2 tenim $n = 2$. Per tant, $\alpha = \lambda(\lambda + 2 - 1) = \lambda(\lambda + 1)$ i la degeneració resulta:

$$\binom{\lambda + 2}{\lambda} - \binom{\lambda}{\lambda - 2} = \frac{(\lambda + 2)(\lambda + 1)}{2} - \frac{\lambda(\lambda - 1)}{2} = 2\lambda + 1.$$

En l'esfera S^1 tenim $n = 1$. Per tant, $\alpha = \lambda(\lambda + 1 - 1) = \lambda^2$ i la degeneració resulta: $\binom{\lambda + 1}{\lambda} - \binom{\lambda - 1}{\lambda - 2} = (\lambda + 1) - (\lambda - 1) = 2$.

Si calculem la degeneració d' S^3 trobem:

$$\binom{\lambda + 3}{\lambda} - \binom{\lambda + 1}{\lambda - 2} = \frac{(\lambda + 3)(\lambda + 2)(\lambda + 1)}{6} - \frac{(\lambda + 1)\lambda(\lambda - 1)}{6} = \frac{1}{6}(\lambda + 1)(6\lambda + 6) = (\lambda + 1)^2 = n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

que és la degeneració de l'àtom d'hidrogen.

Referències

- [1] R. Gilmore, *Lie Groups, Physics and Geometry*, Cambridge University Press 2008.
- [2] W. Pauli, Z. Physik 36 (1926) 336.
- [3] V. Fock, Z. Physik 98 (1935) 145, traduït per B. Teese en *Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras*, A. Barut, A. Bohm and Y. Ne'eman Eds., World Scientific, Singapore 1987, p.400 ss.
- [4] https://johncarlosbaez.wordpress.com/2015/03/17/planets_in_the_4th_dimension
- [5] https://en.wikipedia.org/wiki/Great_circle