



A TRANSFORMAÇÃO DE KUSTAA NHEIMO-STIEFEL E O ESPECTRO DE ENERGIA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO RELATIVÍSTICO NÃO-COMUTATIVO

THE KUSTAA NHEIMO-STIEFEL TRANSFORMATION AND THE ENERGY SPECTRUM OF THE RELATIVISTIC NON-COMMUTATIVE HYDROGEN ATOM

M. MAROCOLO¹, R.G.G. AMORIM^{1,2}

¹Instituto de Física, Universidade de Brasília.

²Faculdade do Gama, Universidade de Brasília.

Resumo

Nesse artigo, o espectro de energia e a função de onda associada ao átomo de hidrogênio tridimensional serão encontradas. Para isso, a equação de Klein-Gordon independente do tempo será resolvida para uma partícula sem spin com o auxílio da transformação de Kustaanheimo-Stiefel.

Palavras-chave: Espectro de energia; Função de onda; Átomo de hidrogênio; Equação de Klein-Gordon; Partícula sem spin; Transformação de Kustaanheimo-Stiefel

Abstract

In this article, the energy spectrum and the wave function associated with the tridimensional hydrogen atom will be determined. For that, the time-independent Klein-Gordon equation will be solved for a spinless particle with the aid of the Kustaanheimo-Stiefel transformation.

Keywords: Energy spectrum; Wave function; Hydrogen atom; Klein-Gordon equation; Spinless particle; Kustaanheimo-Stiefel Transformation.

I. INTRODUÇÃO

A mecânica quântica surgiu da experimentação e da observação, aparecendo para explicar o comportamento de sistemas físicos atômicos e subatômicos. O surgimento de ideias como o comportamento dual da luz, comprovada por Thomas Young em 1803, a radiação de corpo negro, enunciada por Gustav Kirchhoff em 1859 e a sugestão de quantização da energia

de Ludwig Boltzmann em 1877 foram as bases da mecânica quântica (CARUSO; OGURI, 2007). Com isso, ficou nítida a necessidade da criação de uma base matemática e física para descrever esses sistemas quânticos.

Após todo esse embasamento, noções sobre autovalores, autovetores, operadores e comutatividade foram usados juntamente com o conceito de função de onda e estado quântico em busca de equações que descrevessem esses sistemas.

Por se mostrar abstrata no início, várias interpretações sobre a mecânica quântica vieram para ajudar na sua visualização. A mais famosa é a interpretação de Copenhague (EINSTEIN, 2014), que reflete uma natureza probabilística da mecânica quântica e propõe como o ato de observar pode afetar esses sistemas. Porém, também há a interpretação de Bohm, que afirma o postulado Louis de Broglie e diz que a função de onda é responsável por carregar e guiar a partícula.

Em 1926, Erwin Schrödinger publicou sua equação para descrever como um estado quântico ou uma função de onda ψ evolui no espaço e no tempo (SCHRÖDINGER, 1926), como pode ser visto a seguir na equação (1) a seguir.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

A equação foi de extrema importância para a época e outras equações apareceram para acrescentar algo a mais nela, seja considerando o *spin* da partícula, efeitos eletromagnéticos e a relatividade. Com isso, a equação de Klein-Gordon veio para descrever como um estado quântico se comporta em velocidades próximas à da luz já que a equação Schrödinger não é consistente com relatividade especial.

Para solucionar essas equações, ou seja, encontrar as funções de onda e os níveis de energia, algumas técnicas de resolução de equações diferenciais começaram a ser implementadas, sendo a mais comumente utilizada a separação de variáveis. Além disso, a mudança do sistema de coordenadas juntamente com transformadas, transformações lineares e não lineares auxiliam no momento da resolução.

Esse artigo apresentará na seção II a equação de Klein-Gordon e a energia potencial elétrica. Na seção III a transformação de Kustaanheimo-Stiefel será mostrada. Na seção IV a transformação será aplicada à equação de Klein-Gordon para a obtenção da função de onda e na seção V, os níveis de energia associados. E por fim, na seção VI serão feitas as conclusões finais.

II. EQUAÇÃO DE KLEIN-GORDON E O POTENCIAL DE COULOMB

A equação de Klein-Gordon é a equação de rege como uma partícula quântica, sem *spin* e próximas a velocidade da luz evolui espacial e temporalmente. Ela tem algumas representações, sendo a mais comum a expressão no espaço de momento, como pode ser visto na equação (2) a seguir, onde o operador momento foi isolado.

$$\hat{\mathbf{p}}^2 \psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hat{E}^2}{c^2} - m^2 c^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

A equação acima é a relação de energia-momento da relatividade, porém, o momento

linear não é clássico e sim o operador quântico $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Outro termo de extrema importância na equação (2) é o operador energia $\hat{E}$, que para o átomo de hidrogênio será a energia do elétron E mais a energia potencial V .

A energia potencial que dita a interação próton-elétron é a energia potencial elétrica ou potencial de Coulomb que é expressa pela equação a seguir.

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|} \quad (3)$$

Como pode ser visto na equação (3) o potencial elétrico não depende do tempo, ou seja, na equação de Klein-Gordon, a função de onda será em função somente do espaço, ou seja, $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})$ ou para simplificar a notação, somente ψ .

Dessa maneira, substituindo $\hat{E} = E + V(\mathbf{r})$ na equação (2) tem-se a equação (4) a seguir.

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = \left(\frac{E^2}{c^2} + \frac{2e^2E}{4\pi\epsilon_0 c^2 |\mathbf{r}|} + \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 c^2 |\mathbf{r}|^2} - m^2 c^2 \right) \psi \quad (4)$$

Considerando $\frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 c^2} \cong 0$ e substituindo $|\mathbf{r}| = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ pode-se obter a equação (5).

$$\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) \psi - \frac{\kappa}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \psi = \varepsilon \psi \quad (5)$$

Em que $\kappa = \frac{2e^2E}{4\pi\epsilon_0 c^2}$ e $\varepsilon = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2$.

III. TRANSFORMAÇÃO DE KUSTAAHEIMO-STIEFEL

A transformação de Kustaanheimo-Stiefel apareceu na tentativa de generalizar a transformação de Levi-Civita (BREITER; LANGNER, 2018). Porém, devido ao teorema de Hurwitz (AHLFORS, 1966), essa transformação não é possível para o caso tridimensional, sendo possível ser feita somente em quatro dimensões. Logo, a transformação de Kustaanheimo-Stiefel é uma transformação não linear $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que obedece as seguintes equações a seguir com a condição $vdu - udv - wdt + tdw = 0$.

$$\begin{aligned} x &= 2(us - vw) \\ y &= 2(uw + vs) \\ z &= u^2 + v^2 - s^2 - w^2 \end{aligned} \quad (6)$$

Considerando a função $f(x, y, z)$ ou $f(x(u, v, s, w), y(u, v, s, w), z(u, v, s, w))$ pode-se aplicar a regra da cadeia em f para encontrar suas derivadas parciais.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial u} \\ \frac{\partial}{\partial v} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2s & 2w & 2u \\ -2w & 2s & 2v \\ 2u & 2v & -2s \\ -2v & 2u & -2w \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Isolando as derivadas parciais em x , y e z tem-se as equações a seguir.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{1}{2\rho} \left(s \frac{\partial}{\partial u} - w \frac{\partial}{\partial v} + u \frac{\partial}{\partial s} - v \frac{\partial}{\partial w} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{1}{2\rho} \left(w \frac{\partial}{\partial u} + s \frac{\partial}{\partial v} + v \frac{\partial}{\partial s} + u \frac{\partial}{\partial w} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{1}{2\rho} \left(u \frac{\partial}{\partial u} + v \frac{\partial}{\partial v} - s \frac{\partial}{\partial s} - w \frac{\partial}{\partial w} \right)\end{aligned}$$

Em que $\rho = u^2 + v^2 + t^2 + w^2 = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Logo, pode-se aplicar os operadores momento linear e obter as relações a seguir.

$$p_x = \frac{1}{2\rho} (sp_u - wp_v + up_s - vp_w) \quad (7)$$

$$p_y = \frac{1}{2\rho} (wp_u + sp_v + vp_s + up_w) \quad (8)$$

$$p_z = \frac{1}{2\rho} (up_u + vp_v - sp_s - wp_w) \quad (9)$$

IV. FUNÇÃO DE ONDA

Com os operadores momento no domínio de Kustaanheimo-Stiefel pode-se agora, transformar a equação (5) de $\mathbb{R}^3$ para $\mathbb{R}^4$, ou seja $\psi = \psi(u, v, s, w)$, com as equações (7), (8) e (9). Logo, se obtém a equação a seguir, sob a condição $vp_u - up_v - wp_s + sp_w = 0$.

$$\left(p_u^2 + p_v^2 + p_s^2 + p_w^2 \right) \psi - \varepsilon(u^2 + v^2 + s^2 + w^2)\psi = 2\kappa\psi \quad (10)$$

Considerando a não comutatividade entre 2 planos distintos, o plano $u - v$ e o plano $s - w$, eles satisfazem $[\hat{u}, \hat{v}] = [\hat{s}, \hat{w}] = i\theta$. Logo, os operadores momento linear e posição linear podem ser dados pelas relações a seguir.

$$\begin{cases} \hat{p}_u = -i\hbar \frac{\partial}{\partial u} \\ \hat{p}_v = -i\hbar \frac{\partial}{\partial v} \\ \hat{p}_s = -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \\ \hat{p}_w = -i\hbar \frac{\partial}{\partial w} \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{u} = u - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial u} \\ \hat{v} = v - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial v} \\ \hat{s} = s - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial s} \\ \hat{w} = w - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial w} \end{cases} \quad (11)$$

Substituindo as relações de (11) na equação (10) chega-se na equação a seguir.

$$-\left(\hbar^2 - \frac{\varepsilon\theta^2}{4} \right) \nabla_{ks}^2 \psi + i\varepsilon \left(u \frac{\partial}{\partial v} - v \frac{\partial}{\partial u} + w \frac{\partial}{\partial s} - s \frac{\partial}{\partial w} \right) \psi - \varepsilon\rho\psi = 2\kappa\psi \quad (12)$$

Em que ∇_{ks}^2 é o laplaciano nas coordenadas de Kustaanheimo-Stiefel, ou seja, $\nabla_{ks}^2 = \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial w^2}$.

Fazendo a separação de variáveis $\psi(u, v, s, w) = g(u, v)h(s, w)$ e substituindo em (12), chega-se na equação a seguir, em que $\lambda = \frac{\varepsilon\theta^2}{4} + \hbar^2$.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{g} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \right) + \frac{i\varepsilon\theta}{g} \left(u \frac{\partial g}{\partial v} - v \frac{\partial g}{\partial u} \right) - \varepsilon(u^2 + v^2) - \kappa \\ = \\ \frac{\lambda}{h} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial w^2} \right) + \frac{i\varepsilon\theta}{h} \left(w \frac{\partial h}{\partial s} - s \frac{\partial h}{\partial w} \right) - \varepsilon(s^2 + w^2) - \kappa \end{aligned}$$

Como a equação é análoga para g e h pode-se resolver somente para uma delas. Aqui será resolvida somente para g e a solução para h será encontrada por analogia.

Fazendo o lado direito da equação igual a Δ , tem-se a equação a seguir.

$$\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} + \frac{i\varepsilon\theta}{\lambda} \left(u \frac{\partial g}{\partial v} - v \frac{\partial g}{\partial u} \right) - \frac{\varepsilon}{\lambda}(u^2 + v^2)g - (\kappa + \Delta)g = 0 \quad (13)$$

Fazendo uma nova substituição de variáveis $q = u^2 + v^2$ na equação (13), logo $g(u, v) = g(q)$ e tem-se a equação a seguir.

$$q \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} + \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\varepsilon}{4\lambda} q g - \frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} g = 0 \quad (14)$$

Fazendo $g(q) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}q} \phi(q)$ e substituindo na equação (14).

$$q \frac{\partial^2 \phi}{\partial q^2} + \left(1 - 2q \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}} \right) \frac{\partial \phi}{\partial q} + \frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} \phi = 0 \quad (15)$$

Uma nova substituição de variáveis foi feita, fazendo $\eta = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}q$ para chegar na próxima equação.

$$\eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + (1 - \eta) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \sqrt{\frac{\lambda}{\varepsilon}} \left(\frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}} \right) \phi = 0 \quad (16)$$

A equação (16) é equação diferencial de Laguerre com solução sendo os polinômios de Laguerre dado pela expressão a seguir.

$$L_n(\eta) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{n!}{(n-k)!(k!)^2} \eta^k$$

Além disso, o termo que acompanha ϕ (vindo da equação da função g) é um número inteiro n_1 e para a equação da função h é um número inteiro n_2 . Logo, para a variável g tem-se a solução (17) e para h em (18) a seguir.

$$g(u, v) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2)} L_{n_1} \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2) \right) \quad (17)$$

$$h(s, w) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2)} L_{n_2} \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2) \right) \quad (18)$$

Logo, a função de onda no espaço de Kustaanheimo-Stiefel é dada pela multiplicação da equação (17) e da equação (18) e é vista na equação (19).

$$\psi(u, v, s, w) = e^{-\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}\rho} L_{n_1} \left(2\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2) \right) L_{n_2} \left(2\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2) \right) \quad (19)$$

V. NÍVEIS DE ENERGIA

Como dito na seção IV os números que acompanham a função g é um número inteiro n_1 e para a função h é um número n_2 vistos na equação (20) e (21) a seguir.

$$n_1 = \sqrt{\frac{\lambda}{\epsilon}} \left(\frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}} \right) \quad (20)$$

$$n_2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\epsilon}} \left(\frac{\kappa - \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}} \right) \quad (21)$$

Fazendo $N = n_1 + n_2 + 1$ ainda tem-se um número inteiro, logo, após manipulações chega-se na equação a seguir.

$$N^2 = \frac{\kappa^2}{4\lambda\epsilon} \quad (22)$$

Substituindo $\kappa = \frac{2e^2 E}{4\pi\epsilon_0 c^2}$, $\epsilon = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2$ e $\lambda = \frac{\epsilon \hbar^2}{4} + \hbar^2$ pode-se isolar a energia E chegando a equação a seguir.

$$aE^4 - bE^2 + d = 0 \quad (23)$$

Que tem solução dada pela equação (24).

$$E_N = \sqrt{\frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4ad}}{2a}} \quad (24)$$

Em que:

$$\begin{aligned} a &= \frac{\theta^4}{c^4} \\ b &= 2\theta^2 m^2 + \frac{4\hbar^2}{c^2} + \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0^2 c^4 N^2} \\ c &= m^2 c^2 (\theta^2 m^2 c^2 + 4\hbar^4) \end{aligned}$$

VI. CONCLUSÃO

A transformação de Kustaanheimo-Stiefel se mostrou muito útil na resolução da equação de Klein-Gordon para o átomo de hidrogênio tridimensional. Ela transformou um problema $\mathbb{R}^3$ em $\mathbb{R}^4$, que inicialmente não aparenta ajudar, porém, o problema em quatro dimensões pode ser solucionado com separação de variáveis em duas dimensões, ou seja " $\mathbb{R}^4 = \mathbb{R}^2 \mathbb{R}^2$ ".

A partir daí, técnicas de substituição de variáveis foram usadas para encontrar a solução da função de onda no espaço de Kustaanheimo-Stiefel, vista na equação (19).

Além disso, um resultado muito importante foi achado na equação (24). Observou-se que a energia depende de um número inteiro N , resultado condizente que a equação de Schrödinger, ou seja, mesmo considerando que o elétron é uma partícula relativística suas energia continuam quantizadas e a ideia sobre pacotes de energia permanecem valendo, assim como no caso não-relativístico.

REFERÊNCIAS

AHLFORS, L. *Complex analysis: An introduction to the theory of analytic functions of one complex variable*. 3. ed. Estados Unidos: McGraw-Hill, 1966. ISBN 0-07-000657-1. 36

BREITER, S.; LANGNER, K. The extended lissajous–levi-civita transformation. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, Estados Unidos, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10569-018-9862-4>>. 36

CARUSO, F.; OGURI, V. *Física Moderna: Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos*. 2. ed. São Paulo, Brasil: Elsevier, 2007. ISBN 85-352-1878-5. 35

EINSTEIN, A. *Letters on Wave Mechanics: Correspondence with H. A. Lorentz, Max Planck, and Erwin Schrödinger*. Estados Unidos: Open Road Integrated Media, 2014. ISBN 1480479888. 35

SCHRÖDINGER, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review Journals Archive*, Suíça, 1926. 35