Factorización supersimétrica y degeneración accidental del átomo de hidrógeno

Víctor Granados García*
Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas
Instituto Politécnico Nacional, Edificio 9
Unidad Profesional Zacatenco, 07738 México, D.F.
(Recibido el 18 de abril de 1991; aceptado el 5 de junio de 1991)

Resumen. Se analiza la degeneración accidental del átomo de hidrógeno mediante la factorización supersimétrica de Witten. Se obtienen las funciones propias con los operadores de ascenso y descenso para la parte radial de la ecuación de Schrödinger, y se identifican estos operadores con las componentes irreducibles del vector de Runge-Lenz.

PACS: 03.65.–w, 11.30.Pb

1. Introducción

El método de Infeld [1,2] para la factorización de la ecuación de Schrödinger y la mecánica cuántica supersimétrica de Witten [3] están relacionados, como hizo notar Gendenshtein [4]. Esto permite tratar esta última con el método de factorización, dando como resultado la factorización supersimétrica que tiene las propiedades de ambos; y además la ventaja que proporciona la sistematización y estructura del método de factorización, lo cual no se usa comúnmente. Aquí se usa la factorización supersimétrica de la parte radial de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, lo cual proporciona operadores de creación y destrucción, útiles para obtener las funciones propias y relaciones entre ellas para la parte radial, así como caracterizar su degeneración accidental, como una propiedad característica de un hamiltoniano supersimétrico. Por otra parte, se sabe que la degeneración accidental en el átomo de hidrógeno [5], es debida a la existencia del vector constante de movimiento de Runge-Lenz, cuyas componentes junto con las del momento angular, forman un álgebra de Lie SO(4), cuyas representaciones irreducibles generan un multiplete degenerado. Es, por lo tanto, de esperarse alguna relación entre los operadores de creación y destrucción de la factorización y las componentes esféricas irreducibles del vector de Runge-Lenz. Este trabajo está estructurado del siguiente modo: en la Sec. 2 se introduce, de la manera más general posible, el método de factorización de Infeld y la mecánica cuántica supersimétrica de Witten que forman la factorización supersimétrica; en la Sec. 3, se factoriza la parte radial de la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno, se obtienen los operadores de creación y destrucción, y las funciones propias, identificándose los operadores de la

*Area de Física de CBI-UAM-A, México, D.F.

factorización con las componentes esféricas irreducibles del vector de Runge-Lenz, por último se dan las conclusiones obtenidas.

2. Métodos de factorización de Infeld y mecánica cuántica supersimétrica

Se considera la ecuación de Schrödinger para un potencial $V(x,\ell)$ que depende de un parámetro ℓ, que puede tomar valores enteros,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(x,\ell)}{dx^2} + V(x,\ell)Y(x,\ell) = EY(x,\ell). \tag{1}$$

Se ha puesto explícitamente la dependencia en ℓ de las funciones propias $Y(x,\ell)$ en esta ecuación ya que determina un número cuántico, además de jugar un papel muy importante en el método de factorización. Esta ecuación se escribe con $r(x,\ell) = -2mV(x,\ell)/\hbar^2$ y $\lambda = 2mE/\hbar^2$ en forma estándar

$$\frac{d^2Y(x,\ell)}{dx^2} + r(x,\ell)Y(x,\ell) + \lambda Y(x,\ell) = 0. \tag{2}$$

De acuerdo con Infeld y Hull (IH) [1,2], se dice que la Ec. (2) se puede factorizar, si es posible determinar dos funciones $f(x,\ell)$ y $L(\ell)$, que definen los operadores A_ℓ y A_ℓ^+ adjunto uno del otro

$$A_\ell = f(x,\ell) - \frac{d}{dx} \tag{3a}$$

$$A_\ell^+ = f(x,\ell) + \frac{d}{dx}, \tag{3b}$$

tales que cada una de las siguientes ecuaciones sea equivalente a la Ec. (2) original,

$$A_{\ell+1}^+A_{\ell+1}Y(x,\ell) = (\lambda - L(\ell+1)Y(x,\ell) \tag{4a}$$

$$A_\ell A_\ell^+ Y(x,\ell) = (\lambda - L(\ell))Y(x,\ell). \tag{4b}$$

La idea fundamental del método de factorización es que los operadores A_ℓ y A_ℓ^+ se pueden usar como operadores de ascenso y descenso respectivamente, por lo cual se pueden obtener relaciones de recurrencia para las soluciones $Y(x,\ell)$ de la Ec. (2) o entre las soluciones de las ecuaciones equivalentes ($4a$,b) para un mismo valor de λ. Estas ecuaciones equivalentes son las que permiten una relación con la mecánica cuántica supersimétrica como se verá más adelante.

Si $Y(x,\ell)$ es solución de la Ec. ($4a$), entonces $Y(x,\ell+1) = A_\ell Y(x,\ell)$ es solución de la Ec. ($4b$) con la misma energía, para el entero $\ell+1$ indicado en la notación.

En efecto, multiplicando la Ec. ($4a$) por $A_{\ell+1}$ el resultado es

$$A_{\ell+1}A_{\ell+1}^{+}Y(x,\ell+1)=(\lambda-L(\ell+1))Y(x,\ell+1). \tag{5}$$

Similarmente, si $Y(x,\ell)$ es solución de la Ec. ($4b$) entonces $Y(x,\ell-1)=A_{\ell}^{+}Y(x,\ell)$, es solución de la Ec. ($4a$) con la misma energía para el entero $\ell-1$ indicado. Multiplicando la Ec. ($4b$) por A_{ℓ}^{+} se tiene,

$$A_{\ell}^{+}A_{\ell}Y(x,\ell-1)=(\lambda-L(\ell))Y(x,\ell-1). \tag{6}$$

Las condiciones de equivalencia entre las Ecs. (2) y ($4a$,b), en el sentido de ser reemplazables entre sí, se obtienen sustituyendo en estas últimas la forma explícita de los operadores de ascenso y descenso y comparando con la Ec. (2). Como resultado se obtienen las siguientes ecuaciones, en las que las funciones primadas representan la derivada con respecto a x,

$$-r(x,\ell)=f^2(x,\ell)-f'(x,\ell)+L(\ell) \tag{7a}$$

$$-r(x,\ell)=f^2(x,\ell+1)+f'(x,\ell+1)+L(\ell+1). \tag{7b}$$

Estas ecuaciones permiten determinar las funciones $f(x,\ell)$ y $L(\ell)$ si el potencial $r(x,\ell)$ es conocido, considerando que $L(\ell)$ no depende de x y que λ no depende de ℓ; despejando de las Ecs. ($7a$,b) se tiene,

$$f(x,\ell)=\frac{1}{2}\frac{r'(x,\ell-1)+r'(x,\ell)}{r(x,\ell-1)-r(x,\ell)} \tag{8}$$

$$L(\ell)=\frac{-1}{2}(r(x,\ell-1)+r(x,\ell))-f^2(x,\ell). \tag{9}$$

Es claro que no para cualquier potencial $r(x,\ell)$, la factorización es posible. Analizando estas ecuaciones, Infeld y Hull [2] establecen que hay seis tipos generales para los cuales el método de factorización es aplicable siempre y cuando la dependencia de $f(x,\ell)$ esté restringida a tomar valores de potencias finitas de ℓ.

Las funciones propias se obtienen del siguiente resultado de IH. Si la función $L(\ell)$ es creciente en el entero ℓ, entonces una condición para que existan soluciones cuadrático integrables es que

$$\lambda_n=\lambda=L(n+1), \tag{10}$$

donde n es un entero con valores tales que $1=0,1,2,\ldots,n$. En efecto, si $Y(x,\ell+1)$ es integrable usando las propiedades de los operadores de ascenso y descenso se puede escribir

$$\langle Y(x,\ell+1)|Y(x,\ell+1)\rangle=(\lambda-L(\ell))\langle Y(x,\ell)|Y(x,\ell)\rangle. \tag{11}$$

Ya que $L(\ell)$ es una función creciente, podrá tenerse el caso para $\ell = n + 1$, que llevaría a una contradicción, pues se tendría $\langle Y(x, \ell + 1|Y(x, \ell + 1)\rangle < 0$, a menos que $Y(x, n + 1) = 0$, o lo que es igual

$$A_{n+1}Y(x, n) = 0 \tag{12}$$

En cuyo caso, de la Ec. (11) se obtiene la condición para determinar la energía de la Ec. (10), que fija λ en términos de n. De manera similar cuando $L(\ell)$ es una función decreciente, la condición para que existan soluciones cuadrático integrables es

$$\lambda = \lambda_n = L(n) \tag{13}$$

donde n es un entero y $\ell = n, n + 1, n + 2, \ldots$ y $Y(x, n)$ satisface ahora

$$A_n^+ Y(x, n) = 0. \tag{14}$$

Si $Y(x, n)$ existe para cualquiera de los casos de las Ecs. (12) o (14), las funciones propias se obtienen aplicando los operadores de descenso y ascenso, respectivamente.

Las Ecs. ($7a,b$) relacionan también dos potenciales $r(x, \ell)$ y $r(x, \ell+1)$, asociados a una secuencia de ecuaciones de Schrödinger para los parámetros ℓ y $\ell + 1$. Se dice entonces, que tales potenciales son asociados, y a las ecuaciones de Schrödinger o hamiltonianos de la secuencia determinada por ellos, se les llama también asociados. Consideradas como los términos de la secuencia de operadores con parámetros ℓ y $\ell + 1$, las Ecs. ($4a,b$) definen dos ecuaciones de Schrödinger asociadas con los potenciales $r(x, \ell + 1)$ y $r(x, \ell)$ con la misma energía λ_n,

$$\frac{d^2Y(x, \ell + 1)}{dx^2} + r(x, \ell + 1)Y(x, \ell + 1) + \lambda Y(x, \ell + 1) = 0 \tag{15a}$$

$$\frac{d^2Y(x, \ell)}{dx^2} + r(x, \ell)Y(x, \ell) + \lambda Y(x, \ell) = 0, \tag{15b}$$

cuyas soluciones, como ya se demostró, están relacionadas por los operadores de ascenso y descenso. Mediante estas ecuaciones y por repetición se puede construir una secuencia de potenciales o hamiltonianos asociados tales que sus espectros de energía difieran por un número finito de niveles de energía dependiente de ℓ, que determina la profundidad del potencial $r(x, \ell)$.

La factorización de IH puede escribirse en el lenguaje de la mecánica cuántica supersimétrica de Witten [3], definiendo las cargas Q_ℓ y Q_ℓ^+

$$Q_\ell = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A_\ell & 0 \end{pmatrix}, \qquad Q_\ell^+ = \begin{pmatrix} 0 & A_\ell^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{16}$$

las cuales determinan el hamiltoniano supersimétrico H_s, por el anticonmutador siguiente

$$H_s = \left\{Q_\ell^+, Q_\ell\right\} = \begin{pmatrix} A_\ell^+ A_\ell & 0 \\ 0 & A_\ell A_\ell^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}. \tag{17}$$

En esta ecuación los hamiltonianos asociados H_+, H_- corresponden a las ecuaciones equivalentes a la original de las Ecs. (4*a*,*b*) o (15*a*,*b*), con los índices correspondientes para el parámetro ℓ. Las cargas Q_ℓ, Q_ℓ^+ satisfacen, también, las relaciones de un álgebra supersimétrica

$$Q_\ell^2 = Q_\ell^{+2} = 0 = \left[Q_\ell^+ Q_\ell, Q_\ell Q_\ell^+\right] \tag{18}$$

$$\left[H_s, Q_\ell\right] = \left[H_s, Q_\ell^+\right] = 0 \tag{19}$$

De estas relaciones se sigue que H_s, H_+ y H_- pueden ser diagonalizados simultáneamente y que el operador H_s es invariante ante las transformaciones generadas por las cargas Q_ℓ, Q_ℓ^+. Esto está de acuerdo con la función de los operadores A_ℓ^+, A_ℓ que conectan estados de las Ecs. (4*a*,*b*), y si ℓ determina un número cuántico secundario entonces se tiene, por las Ecs. (19), que los hamiltonianos H_+, H_- tendrán el mismo espectro salvo el estado base, y para un número cuántico principal n las funciones $Y(x,\ell)$ estarán degeneradas respecto al número cuántico ℓ.

3. Factorización supersimétrica y degeneración accidental

La parte radial de la ecuación de Schödinger para el potencial de Coulomb $V(r) = -e^2/r$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2}\hbar^2 + V(r) - E\right] R(r,\ell) = 0, \tag{20}$$

se puede escribir —haciendo los cambios de variables $Y(r,\ell) = rR(r,\ell)$, $x = 2r/na$, $\lambda = -m^2e^4/n^2\hbar^2$, donde $a = \hbar^2/me^2$ es el radio de Bohr y se considera el espectro de energía $E = -e^2/2an^2$, con $n = 1,2,3,\ldots$— como

$$\left[\frac{d}{dx^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{4}\right)\right] Y(x,\ell) = 0. \tag{21}$$

Esta ecuación, en la forma estándar de la Ec. (2), se puede factorizar con los operadores de ascenso y descenso siguientes,

$$A_\ell = \left(\frac{1}{x} - \frac{n}{2\ell} - \frac{d}{dx}\right), \tag{22}$$

$$A_\ell^+ = \left(\frac{1}{x} - \frac{n}{2\ell} + \frac{d}{dx}\right). \tag{23}$$

Estos, a la vez, determinan dos hamiltonianos asociados, la función creciente $L(\ell) = -n^2/4\ell^2$, $\lambda = -1/4$ y la condición para el espectro $n = \ell+1$, $\ell = 0, 1, 2\dots$ de acuerdo con las Ecs. ($4a$,b) y (10), así

$$H_- Y(x,\ell) = A_\ell A_\ell^+ Y(x,\ell) = \frac{1}{4}\left(\frac{n^2}{\ell^2} - 1\right) Y(x,\ell), \tag{24}$$

$$H_+ Y(x,\ell-1) = A_\ell^+ A_\ell Y(x,\ell-1) = \frac{1}{4}\left(\frac{n^2}{\ell^2} - 1\right) Y(x,\ell-1). \tag{25}$$

El parámetro $\lambda = -1/4$ toma este valor por el cambio de variable hecho y por considerar ya conocida la forma del espectro; pero se puede obtener sin hacer el cambio de variable, y la condición $\ell = n - 1$ es compatible con resultados ya conocidos.

Las funciones propias normalizadas quedan determinadas por los operadores A_ℓ y A_ℓ^+ con los siguientes factores de normalización, que se obtienen de las Ecs. ($4a$,b), (24) y (25).

$$A_\ell Y_n(x,\ell-1) = \frac{1}{2\ell}\sqrt{(n-\ell)(n+\ell)}\, Y_n(x,\ell) \tag{26}$$

$$A_\ell^+ Y_n(x,\ell) = \frac{1}{2\ell}\sqrt{(n-\ell)(n+1)}\, Y_n(x,\ell-1). \tag{27}$$

En estas ecuaciones se ha considerado en las funciones propias el subíndice n del número cuántico principal, con objeto de resaltar el hecho que implica la degeneración accidental en relación con la factorización. Se tiene así, de la Ec. (12), que $Y_n(x, n-1)$ es la función propia básica, en la cual no puede ser aumentado el número $\ell = n - 1$, que es el máximo valor de ℓ para n dado; por lo tanto

$$A_n Y_n(x,n-1) = \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{2} - \frac{d}{dx}\right) Y_n(x,n-1) = 0, \tag{28}$$

cuya solución es la función normalizada

$$Y_n(x,n-1) = \sqrt{\frac{2}{an(2n)!}}\, x^n e^{-x/2}. \tag{29}$$

A partir de esta solución básica, se pueden obtener las funciones propias mediante aplicaciones reiteradas de los operadores de descenso; aplicando k veces se tiene [6] con $\ell = n-1, n-2, \ldots n-(k-1)$

$$Y_n(x, n-k) = \frac{-2(n-k+1)}{\sqrt{(k-1)(2n-k+1)}} \left(\frac{n-k+1}{x} - \frac{n}{2(n-k+1)} + \frac{d}{dx} \right)$$

$$\times \cdots \times \frac{-2(n-1)}{\sqrt{1.2(n-1)}} \left(\frac{n-1}{x} - \frac{n}{2(n-1)} + \frac{d}{dx} \right) Y_n(x, n-1). \quad (30)$$

Cambiando el índice $n-k=\ell$, y sustituyendo en esta ecuación la (29) se tiene,

$$Y_n(x,\ell) = (2)^{n-\ell-1} \frac{(n-1)!}{\ell!(2n-1)!} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{an^2(n-\ell-1)!}}$$

$$\prod_{k=\ell+1}^{n-1} \left(\frac{k}{x} - \frac{n}{2k} + \frac{d}{dx} \right) x^n e^{-x/2}. \quad (31)$$

Usando algunas identidades algebraicas se obtiene, finalmente,

$$Y_n(x,\ell) = (-1)^{n-\ell-1} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{an^2[(n+\ell)!]^3}} e^{-\frac{x}{2}} x^{\ell+1} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x), \quad (32)$$

en la que

$$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x) = x^{-(\ell+1)}(-1)^{n-\ell-1} \frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!} \prod_{k=\ell+1}^{n-1} \left[1 - \frac{2k}{n+k} \left(\frac{d}{dx} + \frac{k}{x} \right) \right] x^n, \quad (33)$$

es un polinomio de grado $n-\ell-1$ en x, que se puede probar que satisface la ecuación de los polinomios asociados de Laguerre. Por lo tanto, la solución que se obtiene en la variable r es la conocida por el método de solución en serie de potencias [7].

Como es bien conocido, la degeneración accidental del espectro de energía es debida [5] a la existencia del vector de Runge-Lenz,

$$\mathbf{A} = \frac{n\hbar}{2me^2} \Big[\mathbf{L} \times \mathbf{P} - \mathbf{p} \times \mathbf{L} \Big] + n\frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (34)$$

Las componentes de este operador, junto con las del momento angular, satisfacen el álgebra de Lie del grupo SO(4)

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, \quad (35)$$

$$[A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, \quad (36)$$

$$[L_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} A_k. \quad (37)$$

De la Ec. (37) se sigue el carácter de vector irreducible del vector de Runge-Lenz, lo cual permite resolver el problema de funciones y valores propios de sus componentes A_{+1}, A_{-1}, como lo ha hecho Biedenharn [5,8], con el resultado sobre las partes radial $R_{n\ell}(r)$ y esférica $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$:

$$A_{+1}R_{n\ell}(r)Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = \left[\frac{(\ell+1)(n^2-(\ell+1))^2}{(2\ell+3)}\right]^{1/2} R_{n\ell}(r)Y_{\ell+1,\ell+1},(\theta,\phi). \quad (38)$$

Por otro lado, la forma explícita del operador A_{+1} se puede obtener usando primero la igualdad entre operadores $\mathbf{p}\times\mathbf{L}+\mathbf{L}\times\mathbf{p} = 2i\mathbf{p}$, con lo cual el operador A_{+1} toma la forma

$$A_{+1} = n\left[\frac{r_{+1}}{r} + \frac{ih}{me^2}p_{+1} - \frac{\hbar}{me^2}(\mathbf{p}\times\mathbf{L})_{+1}\right], \quad (39)$$

y luego, considerando el efecto de los operadores que entran en esta ecuación, tomados como vectores irreducibles [9,10]; se tiene, aplicándolos a la parte esférica $Y_{\ell'\ell}(\theta,\phi)$,

$$\frac{r_{+1}}{r}Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{\ell+1}{2\ell+3}}Y_{\ell+1,\ell+1}(\theta,\phi), \quad (40)$$

$$p_{+1}R_{n\ell}Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = -ih\sqrt{\frac{\ell+1}{2\ell+3}}\left(\frac{dR_{n\ell}}{dr} - \frac{\ell}{r}R_{n\ell}\right)Y_{\ell+1,\ell+1}(\theta,\phi), \quad (41)$$

$$\left(\mathbf{p}\times\mathbf{L}\right)_{+1} = ip_0L_{+1} - ip_{+1}L_0. \quad (42)$$

Pero la acción del operador $(\mathbf{p}\times\mathbf{L})_{+1}$ de la Ec. (42) es la misma que la de el operador $-i\ell p_{+1}$ sobre la función $Y_{\ell\ell}(\theta,\phi)$, ya que

$$L_0Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = L_zY_{\ell\ell}(\theta,\phi) = \ell Y_{\ell\ell}, \quad (43)$$

$$L_+Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = 0. \quad (44)$$

Sustituyendo las Ecs. (40,41,42) en la (39) y (38), se tiene la siguiente ecuación para la parte radial solamente,

$$A_{+1}R_{n\ell}(r) = \left[1 + \frac{h^2(\ell+1)}{me^2}\left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{r}\right)\right]R_{n\ell}(r) = \sqrt{1-\left(\frac{\ell+1}{n}\right)}R_{n\ell_{+}1}(r). \quad (45)$$

Considerando los cambios de variable hechos entonces, se puede identificar el operador de factorización A_ℓ con el operador A_{+1}, y su adjunto A_ℓ^+ con A_{-1}

$$A_\ell = A_{+1}, \quad (46)$$

$$A_\ell^+ = A_{-1}, \tag{47}$$

resultado que era esperado dado que ambos operadores manifiestan la degeneración accidental del átomo de hidrógeno.

Conclusiones

Se ha visto como el método de factorización supersimétrica proporciona un método adeucado para generar las funciones propias y espectros de energía de la ecuación de Schrödinger, así como para analizar su degeneración accidental. En el caso del átomo de hidrógeno se pudieron identificar los operadores de creación y destrucción con las componentes irreducibles del vector de Runge-Lenz que forman con las del vector de momento angular el álgebra de Lie del grupo compacto SO(4).

Referencias

1. L. Infeld, *Phys. Rev.* **59** (1941) 373.
2. L. Infeld y T.E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 21.
3. E. Witten, *Nucl. Phys.* **B 188** (1981) 513.
4. L. Gendenshtein, *JETP Lett.* **38** (1983) 356.
5. L.C. Biedenharn, J.D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics*, Addisson Wesley (1980).
6. K.H. Ruei, *Quantum Theory of Particles and Fields*, University Press, Taiwan (1971).
7. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. I, John Wiley, New York (1965).
8. L.C. Biedenharn, J. Math. Phys. **2** (1961) 433.
9. F. Ramírez Romero, Tesis Profesional, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (1972).
10. H.A. Bethe y E.E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one and two electron atoms*, Springer-Verlag, New York (1957).

Abstract. The accidental degeneracy of hydrogen atom is analyzed through the supersymmetric factorization of Witten. The proper functions are obtained, with the creation and annihilation operators for the radial part of the Schrödinger equation, and these operators are identified as the irreducible components of the Runge-Lenz vector.