

Momento angular

En el Capítulo 6 estudiamos la descripción general de transformaciones físicas en el espacio de Hilbert. Allí estudiamos algunas transformaciones de simetría, los generadores de estas transformaciones y algunas de sus propiedades. Las simetrías son fundamentales en la física y el concepto de simetría de rotación junto con su generador, el momento angular, es una de las más importantes. Asimismo, hemos visto que existen manifestaciones del momento angular sin contraparte clásica, tal como es el espín. En este Capítulo nos concentraremos en el análisis del momento angular en Mecánica Cuántica, analizaremos su representación general y propiedades. Además, estudiaremos las características de la contraparte clásica del momento angular: el momento angular orbital.

11.1. Rotaciones y momento angular

En el Capítulo 6 definimos al momento angular como el *generador de las rotaciones*. Mostramos además que una rotación finita de un ángulo ϕ alrededor del eje \vec{e}_n se encuentra representada por la siguiente transformación unitaria:

$$D(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = e^{-i\frac{\phi}{\hbar}\vec{e}_n \cdot \vec{J}}.$$

Donde \vec{J} representa el momento angular, compuesto por un conjunto de operadores $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ que satisfacen las siguientes relaciones de conmutación:

$$[J_j, J_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}J_l$$

Es decir, dado un estado arbitrario $|\psi\rangle$, el estado 'rotado' $|\psi'\rangle$ resulta ser:

$$|\psi'\rangle = D(R_{\vec{e}_n}(\phi))|\psi\rangle.$$

En este punto es importante volver a enfatizar que, como vimos, la rotación en el espacio de las coordenadas se encuentra representada por una matriz ortogonal $R_{\vec{e}_n}(\phi)$ de 3x3. Mientras que $D(R_{\vec{e}_n}(\phi))$ es una matriz unitaria que actúa en el espacio de estados, y por lo tanto es de dimensión igual a la del espacio de Hilbert al que pertenece $|\psi\rangle$. A continuación analizaremos las propiedades espectrales de los operadores de momento angular.

11.2. Diagonalización simultánea de \vec{J}^2 y J_z

A partir de las relaciones de conmutación para el operador momento angular, es fácil verificar que el operador $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ conmuta con cada componente del momento angular.

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0.$$

Por lo tanto, podremos construir bases de autoestados comunes a \vec{J}^2 y cualquier componente del momento angular. En lo que sigue construiremos estos autoestados para \vec{J}^2 y J_z . Con este fin, será conveniente definir operadores de subida y bajada, que cumplen un rol muy similar a los operadores de creación y destrucción para un oscilador armónico:

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y,$$

y por lo tanto $J_- = J_+^\dagger$. Estos operadores obviamente conmutan con \vec{J}^2 y satisfacen la siguiente relación de conmutación con J_z :

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}.$$

De esta igualdad surge que si el vector $|a, b\rangle$ es autoestado de \vec{J}^2 y J_z con autovalores $a\hbar^2$ y $b\hbar$ respectivamente, entonces $J_{\pm}|a, b\rangle$ es autoestado de \vec{J}^2 y de J_z con autovalores $a\hbar^2$ y $(b \pm 1)\hbar$ respectivamente. Esto surge trivialmente de las identidades

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 J_{\pm}|a, b\rangle &= J_{\pm} \vec{J}^2|a, b\rangle = a\hbar^2 J_{\pm}|a, b\rangle \\ J_z J_{\pm}|a, b\rangle &= (J_{\pm} J_z \pm \hbar J_{\pm})|a, b\rangle = (b \pm 1)\hbar J_{\pm}|a, b\rangle \end{aligned} \quad (11.1)$$

Además es fácil ver que:

$$J_{\mp} J_{\pm} = \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z. \quad (11.2)$$

Con estos ingredientes es relativamente simple encontrar el espectro de \vec{J}^2 y J_z . Para eso procedemos de la siguiente manera.

1. Los autovalores a son positivos, y para cada valor de a el autovalor b está acotado. Esto surge a partir de ver que el operador

$$\vec{J}^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_- J_+ + J_+ J_-) \geq 0,$$

es semidefinido positivo. Para ello observemos que los operadores $J_-J_+ = J_+^\dagger J_+$ y $J_+J_- = J_-^\dagger J_-$ son semi definidos positivos. En efecto, se cumple que para todo estado $|\psi\rangle$, $\langle\psi|J_\mp J_\pm|\psi\rangle = \|J_\pm|\psi\rangle\|^2 \geq 0$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 - J_z^2|a, b\rangle &= (a^2 - b^2)|a, b\rangle \geq 0, \\ \implies a &\geq b^2.\end{aligned}\tag{11.3}$$

2. Para todo a , existe $j \geq 0$ tal que $-j \leq b \leq j$, y además $a = j(j+1)$. Primero expresemos la forma general de la acción de los operadores J_+ y J_- sobre los autoestados de \vec{J}^2 y J_z . Usando (11.2):

$$\begin{aligned}\langle a, b|J_-J_+|a, b\rangle &= \hbar^2(a - b^2 - b) \geq 0 \implies a - b(b+1) \geq 0, \\ \langle a, b|J_+J_-|a, b\rangle &= \hbar^2(a - b^2 + b) \geq 0 \implies a - b(b-1) \geq 0.\end{aligned}$$

Dado un a estas ecuaciones son válidas para todo b . Sin embargo, como vimos en el punto anterior, el espectro de J_z se encuentra acotado. Es decir, $b_{min} \leq b \leq b_{max}$, de manera que la acción de J_+ sobre el autovector con autovalor para b_{max} debe ser cero:

$$\begin{aligned}\langle a, b_{max}|J_-J_+|a, b_{max}\rangle &= \hbar^2(a - b_{max}^2 - b_{max}) = 0 \implies a = b_{max}(b_{max} + 1), \\ \langle a, b_{max}|J_+J_-|a, b_{max}\rangle &= \hbar^2(a - b_{max}^2 + b_{max}) \geq 0 \implies a \geq b_{max}(b_{max} - 1).\end{aligned}$$

Por lo tanto, combinando ambas ecuaciones, concluimos además que $b_{max} \geq 0$. Asimismo, la acción de J_- sobre el autovector con autovalor b_{min} también debe ser cero:

$$\begin{aligned}\langle a, b_{min}|J_+J_-|a, b_{min}\rangle &= \hbar^2(a - b_{min}^2 + b_{min}) = 0 \implies a = b_{min}(b_{min} - 1), \\ \langle a, b_{min}|J_-J_+|a, b_{min}\rangle &= \hbar^2(a - b_{min}^2 - b_{min}) \geq 0 \implies a \geq b_{min}(b_{min} + 1).\end{aligned}$$

Lo que nos lleva a concluir que $b_{min} \leq 0$. Finalmente, vemos que $a = b_{max}(b_{max} + 1) = |b_{min}|(|b_{min}| + 1)$, y por lo tanto $b_{max} = |b_{min}|$. Teniendo en cuenta esto, a partir de ahora cambiaremos de notación: llamaremos $b = m$, $b_{max} = j$ y entonces $a = j(j+1)$; a los autoestados comunes de \vec{J}^2 y J_z los denominaremos entonces $|j, m\rangle$. O sea,

$$|j, m\rangle = |a, b\rangle.$$

3. Espectro de \vec{J}^2 y J_z : j y m son enteros o seminenteros. Más arriba demostramos que los operadores J_\pm nos permiten movernos hacia arriba o hacia abajo del espectro de J_z . O sea, el estado $J_\pm|j, m\rangle$ es autoestado de J_z con autovalor $(m \pm 1)\hbar$. Es decir:

$$J_\pm|j, m\rangle = C_\pm(j, m)|j, m \pm 1\rangle,$$

donde las constantes $C_\pm(j, m)$ se obtienen imponiendo la normalización de los estados $|j, m\rangle$ y resultan ser

$$\begin{aligned}|C_\pm|^2 &= \langle j, m|J_\mp J_\pm|j, m\rangle = \langle j, m|\vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z|j, m\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m(m \pm 1)) \\ &= \hbar^2(j \mp m)(j + 1 \pm m).\end{aligned}$$

En consecuencia, podemos escribir que

$$\begin{aligned} J_{\pm}|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j+1\pm m)}|j, m\pm 1\rangle \end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned} |j, m\pm 1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}}J_{\pm}|j, m\rangle, \\ |j, m\pm 1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j\mp m)(j+1\pm m)}}J_{\pm}|j, m\rangle. \end{aligned}$$

Sabemos que el espectro de J_z está acotado ya que debe valer que $-j \leq m \leq j$. Por lo tanto, como usamos en el punto anterior:

$$\begin{aligned} J_+|j, j\rangle &= 0, \\ J_-|j, -j\rangle &= 0. \end{aligned}$$

El argumento para demostrar que j es entero o semientero ahora es idéntico al usado para encontrar el espectro del oscilador armónico: Supongamos que partimos del estado $|j, j\rangle$ y aplicamos sucesivas veces el operador J_- . Luego de k pasos, llegaremos al estado $|j, j-k\rangle$. Si j no fuera entero o semientero entonces podríamos repetir este procedimiento un número de veces suficiente como para encontrar un valor de $m \leq -j$ lo cual es absurdo. Solamente cuando j es entero o semientero podemos asegurar que partiendo del estado $|j, j\rangle$ llegaremos al estado $|j, -j\rangle$ en un número entero de pasos. La cantidad de pasos es siempre $(2j+1)$.

En resumen, mostramos que los autoestados de J^2 y J_z son tales que:

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle, \quad J_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad \text{con} \quad -j \leq m \leq j$$

donde j puede tomar valores enteros o semienteros.

Es importante notar que los subespacios generados por los vectores $\{|j, m\rangle, -j \leq m \leq j\}$ son invariantes frente a las rotaciones. Esto es fácil de demostrar ya que cualquier rotación es de la forma $D(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \exp(-i\phi\vec{J} \cdot \vec{e}_n)$. En consecuencia el operador $D(R_{\vec{e}_n}(\phi))$ conmuta con \vec{J}^2 y por lo tanto transforma un autoestado de este operador en otro autoestado con el mismo autovalor. O sea, *las rotaciones no mezclan vectores con diferente valor del número cuántico j .*

Para uso futuro, conviene recolectar aquí algunas identidades importantes. Aplicando J_- sucesivas veces al estado $|j, m\rangle$ obtenemos

$$\begin{aligned} J_-|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j+1-m)}|j, m-1\rangle, \\ J_-^k|j, m\rangle &= \hbar^k \sqrt{\frac{(j+m)!(j+k-m)!}{(j+m-k)!(j-m)!}}|j, m-k\rangle, \\ J_-^k|j, j\rangle &= \hbar^k \sqrt{\frac{2j!k!}{(2j-k)!}}|j, j-k\rangle. \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores se deduce la fórmula para obtener el estado $|j, m\rangle$ a partir de $|j, j\rangle$. Esto es, aplicando la fórmula anterior para J_- con $k = j - m$:

$$J_-^{j-m}|j, j\rangle = \hbar^{j-m} \sqrt{\frac{2j! (j-m)!}{(j+m)!}} |j, m\rangle,$$

o bien

$$|j, m\rangle = \frac{1}{\hbar^{j-m}} \sqrt{\frac{(j+m)!}{2j! (j-m)!}} J_-^{j-m} |j, j\rangle. \quad (11.4)$$

11.3. Matrices de J_x y J_y . Ejemplos: spin 1/2 y 1.

En este caso veremos ejemplos de los generadores de las rotaciones para partículas de spin 1/2 y 1. Comenzaremos por notar que las matrices de los operadores J_x y J_y se pueden obtener fácilmente en la base de autoestados de \vec{J}^2 y J_z . Para eso tenemos que recordar que

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-).$$

En consecuencia, usando que

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j, m \pm 1\rangle$$

deducimos que las matrices de J_x y J_y son tales que

$$\begin{aligned} \langle j, m'|J_x|j, m\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \right) \\ \langle j, m'|J_y|j, m\rangle &= \frac{\hbar}{2i} \left(\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} - \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \right) \end{aligned}$$

Podemos calcular explícitamente estas matrices para los casos $j = 1/2$ y $j = 1$.

1. $j = 1/2$. En ese caso tenemos $m = 1/2, -1/2$ (ordenamos los vectores de la base siguiendo el orden decreciente del número m). En este caso, las ecuaciones anteriores implican que cuando $m = 1/2$, el único elemento de matriz no nulo de J_x y J_y es

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| J_x \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}, \quad \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| J_y \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2i}.$$

En consecuencia, las matrices de

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Evidentemente, en este caso obtenemos un viejo resultado (pero lo hacemos de manera constructiva): $J_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$.

2. $j = 1$. En este caso $m = -1, 0, 1$. Cuando $m = 1$ los únicos elementos de matriz no nulos son

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | J_x | 1, 0 \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \langle 1, 0 | J_x | 1, 1 \rangle, & \langle 1, 0 | J_x | 1, -1 \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \langle 1, -1 | J_x | 1, 0 \rangle, \\ \langle 1, 1 | J_y | 1, 0 \rangle &= -i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = -\langle 1, 0 | J_y | 1, 1 \rangle, & \langle 1, 0 | J_y | 1, -1 \rangle &= -i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = -\langle 1, -1 | J_y | 1, 0 \rangle.\end{aligned}$$

En consecuencia las matrices son:

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

11.4. Momento angular orbital

Veamos ahora qué es lo que sucede con las rotaciones sobre las funciones de onda (ignorando el grado de libertad de spin). En este caso, el generador de las rotaciones es el momento angular \vec{J} que se encuentra relacionado con su contraparte clásica y llamamos *momento angular orbital*. El momento angular orbital de una partícula, se define como:

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}.$$

Donde las componentes de este operador,

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x,$$

son tales que se satisfacen las relaciones fundamentales de conmutación del momento angular: $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar L_k$ y además $[\vec{L}^2, L_i] = 0$. En este caso, de la misma forma que \vec{p} genera las traslaciones, se puede mostrar \vec{L} genera las rotaciones en el espacio de las funciones de onda. Usando el hecho de que en la representación posición el operador momento es $p_j = -i\hbar\partial_j$, las componentes del momento angular son

$$L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x).$$

Será útil escribir estos operadores en coordenadas esféricas. Entonces, las componentes del vector posición en estas coordenadas son:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta.$$

La inversa de estas ecuaciones puede escribirse como

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \cos \theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \tan \phi = \frac{y}{x}$$

Por lo tanto las derivadas cruzadas son

$$\begin{aligned}\partial_x r &= \frac{x}{r}, & \partial_y r &= \frac{y}{r}, & \partial_z r &= \frac{z}{r} \\ \partial_x \cos \theta &= -\frac{zx}{r^3}, & \partial_y \cos \theta &= -\frac{zy}{r^3}, & \partial_z \cos \theta &= \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3}, \\ \partial_x \tan \phi &= -\frac{y}{x^2}, & \partial_y \tan \phi &= \frac{1}{x}.\end{aligned}$$

De esta manera,

$$\begin{aligned}\partial_x &= \sin \theta \cos \phi \partial_r - \frac{\sin \theta \cos \theta \cos \phi}{r} \partial_{\cos \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta \cos^2 \phi} \partial_{\tan \phi} \\ \partial_y &= \sin \theta \sin \phi \partial_r - \frac{\sin \theta \cos \theta \sin \phi}{r} \partial_{\cos \theta} + \frac{1}{r \sin \theta \cos \phi} \partial_{\tan \phi} \\ \partial_z &= \cos \theta \partial_r + \frac{\sin^2 \theta}{r} \partial_{\cos \theta}\end{aligned}$$

O, lo que es lo mismo:

$$\begin{aligned}\partial_x &= \sin \theta \cos \phi \partial_r + \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \partial_\theta - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \\ \partial_y &= \sin \theta \sin \phi \partial_r + \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \partial_\theta + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \\ \partial_z &= \cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta\end{aligned}$$

De aquí surge que los operadores de momento angular se pueden escribir como:

$$\begin{aligned}L_x &= i\hbar \left(\sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi \right) \\ L_y &= -i\hbar \left(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi \right) \\ L_z &= -i\hbar \partial_\phi\end{aligned}\tag{11.5}$$

de lo que surge que:

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) \\ L_\pm &= i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\mp i \partial_\theta + \cot \theta \partial_\phi \right)\end{aligned}\tag{11.6}$$

11.4.1. Autovalores y autofunciones de \vec{L}^2 y L_z . Los armónicos esféricos.

A partir de estas expresiones podemos obtener la forma explícita de las funciones de onda de los autoestados de \vec{L}^2 y L_z . Llamaremos a estas autofunciones

$\Psi_{lm}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | l, m \rangle$. En estas expresiones l y m son los autovalores de \vec{L}^2 y L_z respectivamente. De esta manera, estas funciones deben satisfacer las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} L_z \Psi_{lm}(\vec{r}) &= m\hbar \Psi_{lm}(\vec{r}) \\ \vec{L}^2 \Psi_{lm}(\vec{r}) &= l(l+1)\hbar^2 \Psi_{lm}(\vec{r}) \end{aligned}$$

A partir de las expresiones (11.5) y (11.6) podemos notar además que las autofunciones *sólo dependen de la parte angular* de la función de onda. Dado el vector posición $\vec{r} = r\vec{e}_n$, podemos separar la parte angular de la parte radial de la función de onda $\Psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \phi) R(r)$, donde

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \langle \vec{e}_n | l, m \rangle$$

que debe satisfacer:

$$\begin{aligned} L_z Y_l^m(\theta, \phi) &= m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \\ \vec{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Como $R(r)$ es una función arbitraria de cuadrado integrable y normalizada, \vec{L}^2 y L_z no forman un CCOC en el espacio de las funciones de onda ya que sus autovalores no especifican la función de onda completa. La primera condición que deben cumplir estas funciones es

$$\begin{aligned} L_z Y_l^m(\theta, \phi) &= -i\hbar \partial_\phi Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \\ Y_l^m(\theta, \phi) &= e^{im\phi} f_{l,m}(\theta) \end{aligned}$$

Por otra parte, la función de onda del estado con máxima proyección del momento angular (cuando $m = l$) se obtiene a partir de la ecuación $L_+ Y_l^l(\theta, \phi) = 0$:

$$\begin{aligned} L_+ Y_l^l(\theta, \phi) &= \hbar e^{i\phi} (\partial_\theta - l \cot \theta) Y_l^l(\theta, \phi) = 0 \\ \implies (\partial_\theta - l \cot \theta) f_{l,l}(\theta) &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\partial_\theta f_{l,l}(\theta) = l \cot \theta f_{l,l}(\theta).$$

La solución de esta ecuación es inmediata:

$$f_{l,l}(\theta) = (\sin \theta)^l g_l.$$

De todo lo anterior deducimos que podemos escribir

$$Y_l^l(\theta, \phi) = e^{il\phi} (\sin \theta)^l g_l.$$

Donde, por ahora, la constante g_l es elegida de modo tal que la función de onda este normalizada. Una vez obtenida la función de onda de este estado podemos encontrar las funciones de onda de todos aquellos con $m \leq l$ usando que (11.4):

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{2l!(l-m)!}} \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m} Y_l^l(\theta, \phi).$$

que satisfacen las condiciones de normalización

$$\int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, Y_l^m(\theta, \phi) (Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi))^* = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

Usando todas las expresiones anteriores es posible escribir una expresión simple para las funciones $Y_l^m(\theta, \phi)$ que no son otra cosa mas que los *armónicos esféricos*. Esta es:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(l+m)! (2l+1)}{(l-m)! 4\pi}} \frac{e^{im\phi}}{(\sin \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l},$$

Como vimos en la descripción general de momento angular, m puede tomar valores enteros o semienteros. Sin embargo, a partir de un argumento simple veremos que tanto l y como m sólo pueden tomar valores enteros. A partir de la expresión que obtuvimos para $Y_l^m(\theta, \phi)$, la dependencia en ϕ aparece por medio de la exponencial $e^{im\phi}$, y como la función de onda debe ser continua en todo punto, debe valer que

$$Y_l^m(\theta, 0) = Y_l^m(\theta, 2\pi)$$

lo que implica que:

$$e^{im2\pi} = 1.$$

Si m fuera semientero esta expresión podría valer -1, de manera que m y l deben tomar valores enteros.

A modo de ejemplo, incluimos los armónicos esféricos para los valores más bajos de momento angular:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

Otra propiedad que satisface los armónicos esféricos es:

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m (Y_l^m(\theta, \phi))^*. \quad (11.7)$$

Finalmente, recordemos entonces que la función de onda completa se obtiene incluyendo la parte radial, y puede escribirse como:

$$\Psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi) R(r).$$

Donde la condición de normalización para la parte radial es:

$$\int r^2 \, dr \, |R(r)|^2 = 1.$$

11.4.2. Los armónicos esféricos y las rotaciones

Como vimos, los operadores que representan a las rotaciones en el espacio de estados conmutan con \vec{L}^2 y, por lo tanto, dejan invariantes los subespacios asociados con los distintos valores del número cuántico l . Por consiguiente, si aplicamos una rotación a un estado de la forma $|l, m\rangle$ siempre obtendremos una combinación lineal de estados con el mismo valor de l :

$$\begin{aligned} D(R_{\vec{n}}(\varphi)) |l, m\rangle &= \sum_{m'} |l, m'\rangle \langle l, m' | D(R_{\vec{n}}(\varphi)) |l, m\rangle \\ &= \sum_{m'} D_{m',m}^{(l)}(R_{\vec{n}}(\varphi)) |l, m'\rangle. \end{aligned} \quad (11.8)$$

En esta expresión, el símbolo $D^{(l)}$ denota a una matriz de $(2l+1) \times (2l+1)$ que depende de l y de la rotación en cuestión. Estas matrices nos dicen, precisamente, cómo se mezclan los armónicos esféricos.

Veamos cómo es esto: consideremos un autoestado de la posición arbitrario $|\vec{r}\rangle$, donde $\vec{r} = r\vec{e}_r$ y la parte angular de este vector podemos describirla con un versor \vec{e}_r caracterizado por las coordenadas esféricas θ' y ϕ' . Usando esta notación, podemos escribir la función de onda del autoestado $|l, m\rangle$ como:

$$Y_l^m(\theta, \phi) \equiv Y_l^m(\vec{e}_r) = \langle \vec{e}_r | l, m \rangle.$$

La función de onda del estado rotado por $D(R_{\vec{n}}(\varphi))$ será

$$\langle \vec{e}_r | D(R_{\vec{n}}(\varphi)) | l, m \rangle \equiv \langle \vec{e}_r' | l, m \rangle,$$

donde $|\vec{e}_r'\rangle = D^\dagger(R_{\vec{n}}(\varphi)) |\vec{e}_r\rangle$. Tendiendo en cuenta esta expresión y la Ec. (11.8), resulta que

$$\langle \vec{e}_r' | l, m \rangle = Y_l^m(\vec{e}_r') = \sum_{m'} D_{m',m}^{(l)}(R_{\vec{n}}(\varphi)) Y_l^{m'}(\vec{e}_r),$$

donde $\vec{e}_r' = R_{\vec{n}}^T(\varphi) \vec{e}_r$ es el vector que se obtiene rotando \vec{e}_r con la rotación inversa $R_{\vec{n}}^T(\varphi)$.

Podemos aplicar esta expresión a un caso particular y descubrir que los elementos de la matriz de $D^{(l)}$ se relacionan también con armónicos esféricos. Consideremos el versor que antes llamábamos \vec{e}_r apuntando en la dirección del versor \vec{e}_z (o sea, tomamos $\theta = 0$). Si rotamos este versor hasta hacerlo apuntar en la dirección de \vec{e}_r , cuyas coordenadas esféricas son θ y ϕ (es decir, el versor que antes llamábamos \vec{e}_r' ahora será un versor arbitrario \vec{e}_r), entonces podemos escribir que

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sum_{m'} D_{m',m}^{(l)}(R_{\vec{n}}(\varphi)) Y_l^{m'}(0, 0),$$

donde la matriz $R_{\vec{n}}^T$ es la que me lleva del eje \vec{e}_z a \vec{e}_r , es decir $\vec{e}_r = R_{\vec{n}}^T(\varphi) \vec{e}_z$. Los armónicos esféricos son tales que se cumple que

$$Y_l^{m'}(0, 0) = \delta_{m',0} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

sólo es no nulo el $m = 0$, esto también puede verse a partir de notar que $|z\rangle$ es autovector de L_z con autovalor 0. Por lo tanto resulta que

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} D_{0,m}^{(l)}(R_{\vec{n}}(\varphi)).$$

Cabe notar que la rotación si cualquier rotación la podemos representar en términos de los ángulos de Euler: $R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$ entonces $R_{\vec{n}}^T(\varphi) \equiv R(\phi, \theta, 0)$.

11.4.3. Representaciones irreducibles del grupo de las rotaciones en $\mathcal{H}_{\vec{r}}$

Consideremos el espacio de Hilbert de una partícula que se mueve en tres dimensiones. Este espacio, que llamamos $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ donde $\vec{r} = r \vec{e}_r$ tiene una base formada por los autoestados del operador posición, a los que denominamos $|\vec{r}\rangle$ y forman una base. Por otra parte, en este mismo espacio podemos definir otra base, como mencionamos más arriba, que esté asociada a un CCOC integrado por \vec{L}^2 , L_z y algún otro operador que conmute con ambos (y que complete la base). Por ejemplo, en el caso de una partícula en un potencial central, este CCOC podría ser completado por el Hamiltoniano H . De forma que la base está formada por los estados de la forma $|n, l, m\rangle$. En este espacio de Hilbert actúan los representantes de las rotaciones, a los que llamamos $\mathcal{H}(R_{\vec{n}}(\varphi))$. Como vimos, las matrices de rotación no mezclan estados con distinto momento angular l . Es decir, en cada subespacio generado por un dado valor de l actúa un representante de la rotación a la que llamamos $D^{(l)}$. Estos subespacios son llamados “representaciones irreducibles” del grupo de las rotaciones. Si el subespacio con momento angular l se denomina \mathcal{H}_l , entonces el espacio de Hilbert total es la suma directa de todas las representaciones irreducibles. Es decir

$$\mathcal{H}_{\vec{e}_r} = \bigoplus_{l \geq 0} \mathcal{H}_l.$$

11.4.4. Momento angular orbital y energía cinética

Es fácil ver que la energía cinética de una partícula que se mueve en tres dimensiones puede escribirse de modo tal que la parte angular quede determinada completamente por el momento angular. Esto es equivalente a lo que obtenemos cuando escribimos el Laplaciano en coordenadas esféricas. Para deducir la forma explícita de esta relación podemos calcular

$$\vec{L}^2 = (\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot (\vec{r} \wedge \vec{p})$$

Este producto escalar puede reescribirse en términos de las componentes de los vectores posición y momento de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= \sum_{j,k,l,m,n} \epsilon_{jkl} \epsilon_{jmn} r_k p_l r_m p_n \\
&= \sum_{k,l,m,n} (\delta_{k,m} \delta_{l,n} - \delta_{k,n} \delta_{l,m}) r_k p_l r_m p_n \\
&= \sum_{k,l} (r_k p_l r_k p_l - r_k p_l r_l p_k) \\
&= \sum_{k,l} (r_k r_k p_l p_l - r_k p_k p_l r_l) + \sum_k 2(-i\hbar r_k p_k) \\
&= \sum_{k,l} (r_k r_k p_l p_l - r_k p_k r_l p_l) + \sum_k 3(i\hbar r_k p_k) + \sum_k 2(-i\hbar r_k p_k) \\
&= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}
\end{aligned}$$

donde usamos que $[r_k, p_l] = i\hbar \delta_{k,l}$. En consecuencia, el operador \vec{p}^2 resulta ser

$$\begin{aligned}
\vec{p}^2 &= \frac{1}{r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \frac{1}{r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \\
&= \hbar^2 \left(-\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r) - \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \right).
\end{aligned}$$

Utilizaremos esta expresión para escribir la componente del Hamiltoniano asociada a la energía cinética cuando estudiemos potenciales centrales.

11.5. Operadores vectoriales

El momento angular \vec{J} es el generador de las rotaciones, lo que quiere decir que $D(R_{\vec{n}}(\phi)) = \exp(-i\phi \vec{n} \cdot \vec{J}/\hbar)$. Es fácil analizar cómo cambia el operador \vec{J} frente a una rotación. En efecto, calculemos

$$\vec{J}' = D^\dagger(R_{\vec{n}}(\phi)) \vec{J} D(R_{\vec{n}}(\phi))$$

Usando las relaciones de conmutación entre las componentes del momento angular, se puede demostrar de manera sencilla que

$$J'_k = \sum_l (R_{\vec{n}}(\phi))_{kl} J_l$$

Esto quiere decir, que las rotaciones afectan al operador \vec{J} de la misma manera que lo hacen con un vector en el espacio \mathbb{R}^3 . Las componentes del operador rotado son combinaciones lineales de las componentes del operador sin rotar, siendo los

coeficientes de esa combinación lineal los elementos de la matriz de rotación (de 3×3) correspondiente.

En efecto, cualquier terna de operadores que cumpla con esta misma condición forman un *operador vectorial*. Es decir, $\vec{V} = V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z$ es un operador vectorial si y sólo si se cumple que

$$V'_k = D^\dagger(R_{\vec{n}}(\phi))V_kD(R_{\vec{n}}(\phi)) = \sum_l (R_{\vec{n}}(\phi))_{kl}V_l$$

La condición necesaria y suficiente para que un operador \vec{V} sea vectorial es que se cumplan las siguientes relaciones de conmutación

$$[J_j, V_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}V_l$$

Para demostrar esta identidad basta con considerar una rotación alrededor del eje \vec{e}_z en un ángulo infinitesimal. En ese caso tenemos que $D(R_{\vec{z}}(\phi)) = I - i\phi J_z/\hbar$. Entonces, la condición de que el operador sea vectorial es equivalente a

$$V'_j = V_j + i\phi(J_zV_j - V_jJ_z)/\hbar = \sum_k (R_{\vec{z}}(\phi))_{jk}V_k$$

Usando la forma explícita de la matriz de rotación que es tal que (a primer orden en ϕ) sus únicos elementos no nulos son $R_{kk} = 1$, $R_{xy} = -\phi = -R_{yx}$, obtenemos las condiciones:

$$i(J_zV_x - V_xJ_z) = -\hbar V_y, \quad i(J_zV_y - V_yJ_z) = \hbar V_x$$

de donde se desprende que debe valer $[J_k, V_l] = i\hbar\epsilon_{klm}V_m$.