

Ejemplo del uso de operadores escalera para generar funciones de momento angular acopladas.

Eigenfunciones p_j .

Se presentan ejemplos de la construcción de las eigenfunciones de los operadores de momento angular electrónico total $\vec{j}^2$ y j_z de los estados p_j a partir de los armónicos esféricos Y_{1,m_ℓ} y de las eigenfunciones de espín α y β .

Empezamos calculando el efecto de los operadores escalera sobre una eigenfunción de momento angular. Sabemos que los operadores escalera aplicados a un armónico esférico Y_{ℓ,m_ℓ} satisfacen

$$\begin{aligned}\ell_+ Y_{\ell,m_\ell} &= C_+ Y_{\ell,m_\ell+1} \\ \ell_- Y_{\ell,m_\ell} &= C_- Y_{\ell,m_\ell-1}\end{aligned}\tag{1}$$

Para obtener las constantes C_+ y C_- tomamos las normas cuadradas de los dos miembros de estas igualdades

$$\begin{aligned}\int \int d\Omega |\ell_+ Y_{\ell,m_\ell}|^2 &= |C_+|^2 \\ \int \int d\Omega |\ell_- Y_{\ell,m_\ell}|^2 &= |C_-|^2\end{aligned}\tag{2}$$

Por otra parte recordemos que en las notas se demuestran las siguientes relaciones para las normas de $\ell_+ Y_{\ell,m_\ell}$ y $\ell_- Y_{\ell,m_\ell}$:

$$\begin{aligned}\int \int d\Omega |\ell_+ Y_{\ell,m_\ell}|^2 &= [\ell(\ell+1) - m_\ell^2 - m_\ell] \hbar^2 \\ \int \int d\Omega |\ell_- Y_{\ell,m_\ell}|^2 &= [\ell(\ell+1) - m_\ell^2 + m_\ell] \hbar^2\end{aligned}\tag{3}$$

De estas expresiones se obtienen las constantes C_+ y C_- y podemos escribir el efecto de aplicar los operadores escalera de la forma

$$\begin{aligned}\ell_+ Y_{\ell,m_\ell} &= \sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)} \hbar Y_{\ell,m_\ell+1} \\ \ell_- Y_{\ell,m_\ell} &= \sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell-1)} \hbar Y_{\ell,m_\ell-1}\end{aligned}\tag{4}$$

Estas relaciones se obtuvieron para las funciones de momento orbital, pero son válidas también para funciones de momento angular semientero.¹

¹Recordemos que todas estas expresiones se obtienen empleando las relaciones de conmutación de las componentes de momento angular.

Consideremos ahora el caso de un electrón p . Utilizando la segunda de las relaciones 4 con $\ell = 1$ y $m = 1, 0$ y -1 se obtiene

$$\begin{aligned}\ell_- Y_{1,1} &= \sqrt{2}\hbar Y_{1,0} \\ \ell_- Y_{1,0} &= \sqrt{2}\hbar Y_{1,-1} \\ \ell_- Y_{1,-1} &= 0\end{aligned}\tag{5}$$

La misma relación 4 puede ser empleada para el operador de espín s_- , en este caso con $\ell = s = 1/2$ y con $m_s = 1/2$ o $-1/2$, resultando

$$\begin{aligned}s_- \alpha &= \hbar \beta \\ s_- \beta &= 0\end{aligned}\tag{6}$$

Por otra parte, escribimos el operador de momento angular electrónico total $\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$. Entonces también podemos escribir $j_z = \ell_z + s_z$ y $j_- = \ell_- + s_-$. Para $\ell = 1$ y $s = 1/2$ el máximo valor posible de la proyección $m_j = 3/2$ es la suma de las máximas proyecciones $m_\ell = 1$ y $m_s = 1/2$. La función de onda de este estado es

$$\psi_{p_{3/2}, 3/2} = Y_{1,1} \alpha\tag{7}$$

donde hemos utilizado los valores de j y m_j como etiquetas del estado acoplado. La función con $j = 3/2$ y $m_j = 1/2$ se obtiene aplicando $j_- = \ell_- + s_-$ a esta expresión, teniendo cuidado de emplear la relación 4 para cada operador. Resulta

$$j_- \psi_{p_{3/2}, 3/2} = (\ell_- + s_-) Y_{1,1} \alpha\tag{8}$$

pero, usando 4

$$j_- \psi_{p_{3/2}, 3/2} = \sqrt{3}\hbar \psi_{p_{3/2}, 1/2}\tag{9}$$

y también

$$(\ell_- + s_-) Y_{1,1} \alpha = \sqrt{2}\hbar Y_{1,0} \alpha + \hbar Y_{1,1} \beta\tag{10}$$

Igualando estas dos expresiones y resolviendo para $\psi_{p_{3/2}, 1/2}$ se obtiene

$$\psi_{p_{3/2}, 1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,0} \alpha + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,1} \beta\tag{11}$$

Aplicando nuevamente j_- a este resultado se obtiene

$$2\hbar \psi_{p_{3/2}, -1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}}\hbar \left[\sqrt{2} Y_{1,-1} \alpha + Y_{1,0} \beta \right] + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{2}\hbar Y_{1,0} \beta\tag{12}$$

y por tanto

$$\psi_{p_{3/2}, -1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}\beta \quad (13)$$

Queda como ejercicio demostrar que si se aplica j_- a esta función se obtiene la función que se espera, con mínima proyección de momento angular total $m_j = -3/2$, que es

$$\psi_{p_{3/2}, -3/2} = Y_{1,-1}\beta \quad (14)$$

Nótese que como los armónicos esféricos Y_{1,m_ℓ} y las eigenfunciones de espín α y β son ortonormales las eigenfunciones de $\vec{j}^2$ y j_z que hemos construido son ortonormales también.

Falta obtener las funciones para $j = 1/2$ con proyecciones $m_j = \pm 1/2$. Hay dos formas de lograrlo. Por una parte es claro que la función con $m_j = 1/2$ debe ser una combinación lineal de $Y_{1,0}\alpha$ y $Y_{1,1}\beta$. Además la combinación lineal debe ser ortogonal a la función 11. La función que satisface esta condición es

$$\psi_{p_{1/2}, 1/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1}\beta + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0}\alpha \quad (15)$$

donde hay la posibilidad de multiplicar el miembro derecho por -1 (otra vez aparece una fase arbitraria). Queda como ejercicio demostrar que si se aplica j_- a esta función se obtiene

$$\psi_{p_{1/2}, -1/2} = -\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0}\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,-1}\alpha \quad (16)$$

En el primer ejercicio sobre efecto Stark en los estados $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$ se presenta la otra forma de obtener estos mismos resultados. Se parte de una combinación lineal de las funciones cuyas proyecciones m_ℓ y m_s satisfacen $m_\ell + m_s = 1/2$ con coeficientes arbitrarios. Al aplicar ℓ_+ a esta función se debe obtener 0. Esta condición y la normalización de la función de onda permite obtener los coeficientes de mezcla.

Para $\ell = 1$ y $s = 1/2$ hemos obtenido un conjunto ortonormal de seis funciones, combinaciones lineales de productos de armónicos esféricos y eigenfunciones de espín, que son eigenfunciones del cuadrado de momento angular total $\vec{j}^2$ y su proyección j_z , con $j = 3/2$ y $1/2$. Es claro que este procedimiento se puede generalizar para construir las eigenfunciones de una suma de

dos momentos angulares j_1 y j_2 que conmutan entre sí, a partir de combinaciones lineales de productos de eigenfunciones de cada uno de los momentos angulares.