Autofunciones del momento angular. Polinomios de Legendre, funciones asociadas de Legendre y armónicos esféricos.

En este apartado vamos a ver cómo podemos calcular las autofunciones comunes a los operadores $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$. Dichas autofunciones vendrán caracterizadas por los números cuánticos l y m que analizamos en el apartado anterior. Como dichos operadores sólo actúan sobre las variables angulares, podremos escribir las autofunciones comunes en la representación coordenadas de la forma $Y_l^m(\theta,\varphi)$. Lógicamente los autovalores de $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$ son infinitamente degenerados, ya si multiplicamos la función $Y_l^m(\theta,\varphi)$ por una función arbitraria $f(r)$ obtendremos otra función distinta que será también una autofunción común a los operadores $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$ con los mismos autovalores, de modo que dichos operadores no forman un conjunto completo de observables que conmutan. Las autofunciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ las normalizaremos de la siguiente forma:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \, \sin\theta \, Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi) Y_l^m(\theta,\varphi) = \delta_{l'l}\delta_{m'm}$$

En el apartado anterior vimos que las autofunciones del operador $\hat{L}_z$ de autovalor $m\hbar$ dependen de φ de la forma $f(r,\theta)e^{im\varphi}$, por tanto, las autofunciones comunes a $\hat{L}_z$ y $\hat{L}^2$ son de la forma $Y_l^m(\theta,\varphi) = F_l^m(\theta)e^{im\varphi}$. Como ya conocemos la dependencia en φ, sólo tenemos que preocuparnos de la dependencia en θ. Las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ deben satisfacer la siguiente ecuación:

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l\,(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

y teniendo en cuenta la dependencia con φ, la ecuación anterior queda como:

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{dF_l^m(\theta)}{d\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}F_l^m(\theta) = l\,(l+1)\,F_l^m(\theta)$$

Vamos a hacer el cambio de variable $u = \cos\theta$, y teniendo en cuenta que $\frac{d}{d\theta} = -\sqrt{1-u^2}\frac{d}{du}$, la ecuación anterior queda de la forma:

$$\frac{d}{du}\left[\left(1-u^2\right)\frac{dF_l^m}{du}\right] - \frac{m^2}{1-u^2}F_l^m + l\,(l+1)\,F_l^m = 0$$

Esta ecuación se simplifica para el caso $m = 0$, de modo que será el primero que estudiemos. Para $m = 0$ la ecuación se reduce a:

$$\frac{d}{du}\left[\left(1-u^2\right)\frac{dF_l^0}{du}\right] + l\,(l+1)\,F_l^0 = -2u\frac{dF_l^0}{du} + \left(1-u^2\right)\frac{d^2F_l^0}{du^2} + l\,(l+1)\,F_l^0 = 0$$

Podemos resolver esta ecuación desarrollando la función F_l^0 en serie de potencias de u:

$$F_l^0 = \sum_n a_n u^n$$

Introduciendo la serie en la ecuación se encuentra la siguiente expresión:

$$\sum_n \left[-2na_n u^n + n\left(n-1\right)a_n u^{n-2} - n\left(n-1\right)a_n u^n + l\left(l+1\right)a_n u^n\right] = 0$$

Reorganizamos los índices para que en todos los términos aparezca la misma potencia de u:

$$\sum_n \left[-2na_n + \left(n+2\right)\left(n+1\right)a_{n+2} - n\left(n-1\right)a_n + l\left(l+1\right)a_n\right]u^n =$$

$$= \sum_n \left[\left(n+2\right)\left(n+1\right)a_{n+2} + l\left(l+1\right) - n\left(n+1\right)a_n\right]u^n = 0$$

Para que el término de la izquierda sea nulo se tienen que anular todos los coeficientes, de modo que llegamos a la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes a_n:

$$a_{n+2} = \frac{n\left(n+1\right) - l\left(l+1\right)}{\left(n+2\right)\left(n+1\right)}a_n$$

Como la ecuación diferencial era de segundo grado deben aparecer en la solución dos constantes de integración, que pueden ser los coeficientes a_0 y a_1. Para que la serie sea convergente para todos los valores de u entre ± 1, se puede demostrar que la serie se tiene que cortar para algún valor de n. Esto se consigue si se anula alguno de los dos coeficientes a_0 o a_1. Por ejemplo, si l es par la serie de coeficientes de orden par se cortará para $n = l$, mientras que la serie de coeficientes de orden impar no se cortará, de modo que tenemos que tomar $a_1 = 0$. Por el contrario, cuando l sea impar se debe anular el coeficiente a_0. Por tanto, la solución que hemos encontrado consiste en una serie de polinomios de paridad definida y de grado l. Estos polinomios se pueden obtener directamente de la siguente ecuación (fórmula de Rodrigues):

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l \cdot l!}\frac{d^l}{du^l}\left(u^2 - 1\right)^l$$

Los polinomios $P_l(u)$ se denominan polinomios de Legendre. Los primeros polinomios de Legendre son:

$$\begin{array}{ll} P_0(u) = 1 & P_3(u) = \frac{1}{2}\left(5u^3 - 3u\right) \\ P_1(u) = u & P_4(u) = \frac{1}{8}\left(35u^4 - 30u^2 + 3\right) \\ P_2(u) = \frac{1}{2}\left(3u^2 - 1\right) & P_5(u) = \frac{1}{8}\left(63u^5 - 70u^3 + 15u\right) \end{array}$$

Se puede comprobar que los polinomios de Legendre son ortogonales, es decir, que se verifica la siguiente condición:

$$\int_0^\pi P_l\left(\cos\theta\right)P_{l'}\left(\cos\theta\right)\,\sin\theta\,d\theta = 0 \qquad \text{si } l \neq l'$$

Sin embargo no están normalizados, ya que:

$$\int_0^\pi P_l^2\left(\cos\theta\right)\,\sin\theta\,d\theta = \frac{2}{2l+1}$$

Al igual que hicimos con los polinomios de Hermite se puede encontrar una función generadora para los polinomios de Legendre y es la siguiente:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(u) t^l$$

Ya hemos obtenido las autofunciones comunes a $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$ para $m = 0$, que son (ya normalizadas):

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

Vamos a ver ahora cómo podemos obtener el resto de las autofunciones para $m \neq 0$. La forma más sencilla consiste en aplicar sucesivamente el operador $\hat{L}_+$ y $\hat{L}_-$ a la función $Y_l^0(\theta, \varphi)$. Vamos a ver cómo actúa el operador $\hat{L}_+$ sobre esta función para obtener las funciones $Y_l^m(\theta, \varphi)$ con $m > 0$. Recordamos que la expresión del operador $\hat{L}_+$ en coordenadas esféricas es (salvo la constante $\hbar$):

$$e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Vamos a escribirlo en función de la variable $u = \cos\theta$:

$$e^{i\varphi}\left(-\sqrt{1-u^2}\frac{\partial}{\partial u} + i\frac{u}{\sqrt{1-u^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Lo vamos a aplicar sobre la función $Y_l^0(\theta, \varphi)$ (que no depende de φ):

$$e^{i\varphi}\left(-\sqrt{1-u^2}\frac{\partial}{\partial u} + i\frac{u}{\sqrt{1-u^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_l^0(\theta, \varphi) = -e^{i\varphi}\sqrt{1-u^2}\frac{\partial Y_l^0}{\partial u}$$

Esta función es proporcional a Y_l^1. Vamos a aplicar de nuevo el operador $\hat{L}_+$ para obtener una función proporcional a Y_l^2:

$$e^{i\varphi}\left(-\sqrt{1-u^2}\frac{\partial}{\partial u} + i\frac{u}{\sqrt{1-u^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(-e^{i\varphi}\sqrt{1-u^2}\frac{\partial Y_l^0}{\partial u}\right) =$$
$$e^{i2\varphi}\left(1-u^2\right)\frac{\partial^2 Y_l^0}{\partial u^2} - e^{i2\varphi}u\frac{\partial Y_l^0}{\partial u} + e^{i2\varphi}u\frac{\partial Y_l^0}{\partial u} = e^{i2\varphi}\left(1-u^2\right)\frac{\partial^2 Y_l^0}{\partial u^2}$$

En los dos casos la función que se obtiene es de la forma:

$$Y_l^m \propto (-1)^m e^{im\varphi}\left(1-u^2\right)^{m/2}\frac{\partial^m Y_l^0}{\partial u^m}$$

Vamos a comprobar que la ecuación anterior es general, es decir, que si aplicamos de nuevo el operador $\hat{L}_+$ al término de la derecha de la ecuación anterior debemos obtener que

$$Y_l^{m+1} \propto (-1)^{m+1} e^{i(m+1)\varphi}\left(1-u^2\right)^{(m+1)/2}\frac{\partial^{m+1} Y_l^0}{\partial u^{m+1}}$$

Realizamos el cálculo explícitamente:

$$e^{i\varphi}\left(-\sqrt{1-u^2}\frac{\partial}{\partial u}+i\frac{u}{\sqrt{1-u^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left((-1)^m e^{im\varphi}\left(1-u^2\right)^{m/2}\frac{\partial^m Y_l^0}{\partial u^m}\right)=$$

$$-(-1)^m e^{i(m+1)\varphi}\left(1-u^2\right)^{(m+1)/2}\frac{\partial^{m+1}Y_l^0}{\partial u^{m+1}}+$$

$$+(-1)^m e^{i(m+1)\varphi}\sqrt{1-u^2}mu\left(1-u^2\right)^{m/2-1}\frac{\partial^m Y_l^0}{\partial u^m}-m(-1)^m e^{i(m+1)\varphi}u\left(1-u^2\right)^{(m-1)/2}\frac{\partial^m Y_l^0}{\partial u^m}=$$

$$=(-1)^{m+1}e^{i(m+1)\varphi}\left(1-u^2\right)^{(m+1)/2}\frac{\partial^{m+1}Y_l^0}{\partial u^{m+1}}$$

De modo que efectivamente hemos encontrado una expresión general para obtener funciones que son proporcionales a las funciones que buscábamos Y_l^m. Vamos a definir las funciones asociadas de Legendre a partir de los polinomios de Legendre de la siguiente forma:

$$P_l^m(u)=\left(1-u^2\right)^{m/2}\frac{d^m P_l(u)}{du^m}$$

de modo que la dependencia en θ de las funciones Y_l^m viene dada por las funciones asociadas de Legendre, de forma que:

$$Y_l^m(\theta,\varphi)\propto(-1)^m e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)$$

Lo único que nos queda es calcular la constante de normalización. Recordamos que las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ deben verificar la siguiente condición de normalización:

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\ \sin\theta\, Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)=1$$

La dependencia en φ es sencilla y la parte de la integral que depende de φ vale 2π. Por otro lado, las funciones asociadas de Legendre verifican la siguiente condición:

$$\int_{-1}^{1}\left(P_l^m(u)\right)^2du=\int_0^{\pi}\left(P_l^m(\cos\theta)\right)^2\ \sin\theta\ d\theta=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}$$

De modo que las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$, para $m\geq 0$, son de la forma:

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

o bien:

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

Las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ se denominan armónicos esféricos. Vamos a ver ahora cómo son las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ para $m<0$. Recordamos cómo actúan los operadores $\hat{L}_\pm$ sobre las funciones Y_l^m:

$$\hat{L}_\pm|l,m\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\,|l,m\pm1\rangle$$

de modo que:

$$\hat{L}_{\pm} Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{l\,(l+1) - m\,(m \pm 1)}\; Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)$$

Por otro lado, de las expresiones de los operadores $\hat{L}_{\pm}$ en coordenadas esféricas podemos deducir la siguiente propiedad:

$$\left(\hat{L}_+\right)^* = -\hat{L}_-$$

(donde los operadores actúan sobre una función en la representación coordenadas). Vamos a ver qué obtenemos al aplicar el operador $\hat{L}_+$ m veces sobre la función $Y_l^0(\theta,\varphi)$ (con $m \leq l$):

$$\left(\hat{L}_+\right)^m Y_l^0(\theta,\varphi) = \\ = \hbar^m \sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\sqrt{l(l+1)-6}\cdots\sqrt{l(l+1)-(m-1)m}\; Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Si tomamos el complejo conjugado de la expresión anterior y teniendo en cuenta que $Y_l^0(\theta,\varphi)$ es una función real queda:

$$(-1)^m \left(\hat{L}_-\right)^m Y_l^0(\theta,\varphi) = \\ = \hbar^m \sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\sqrt{l(l+1)-6}\cdots\sqrt{l(l+1)-(m-1)m}\; Y_l^{m*}(\theta,\varphi)$$

Por otro lado si aplicamos el operador $\hat{L}_-$ m veces sobre la función $Y_l^0(\theta,\varphi)$ queda:

$$\left(\hat{L}_-\right)^m Y_l^0(\theta,\varphi) = \\ = \hbar^m \sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\sqrt{l(l+1)-6}\cdots\sqrt{l(l+1)-(m-1)m}\; Y_l^{-m}(\theta,\varphi)$$

Por tanto, de las dos últimas ecuaciones deducimos la siguiente propiedad:

$$(-1)^m\, Y_l^{-m}(\theta,\varphi) = Y_l^{m*}(\theta,\varphi)$$

de modo que las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ para $m < 0$ se pueden obtener de las funciones para $m > 0$ mediante la relación:

$$Y_l^{-m}(\theta,\varphi) = (-1)^m\, Y_l^{m*}(\theta,\varphi)$$

(de todos modos, la ecuación que obtuvimos anteriormente para las funciones $Y_l^m(\theta,\varphi)$ es general y vale tanto para $m > 0$ como para $m < 0$).

Por último, vamos a analizar cómo se comportan los armónicos esféricos ante una inversión espacial. Una inversión de los ejes x, y, z, es decir, la transformación $x, y, z \to -x, -y, -z$ equivale en coordenadas esféricas a $r, \theta, \varphi \to r, \pi-\theta, \varphi+\pi$. Aplicamos esta transformación:

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = \frac{(-1)^{l-m}}{2^l \cdot l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; e^{im(\varphi+\pi)}\; \left(\sin(\pi-\theta)\right)^m \times \\ \times \frac{d^{l+m}}{d\left(\cos(\pi-\theta)\right)^{l+m}} \left(\sin(\pi-\theta)\right)^{2l} = (-1)^l\; Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Por tanto los armónicos esféricos tienen paridad bien definida y corresponde a la paridad del número l: si l es par el armónico esférico no cambia ante una inversión espacial y si es impar cambia de signo ante la inversión espacial.

Para terminar este apartado vamos a dar las expresiones de los primeros armónicos esféricos y algunas relaciones de recurrencia.

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\begin{cases} Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\ \cos\theta \\[2ex] Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\ e^{\pm i\varphi}\ \sin\theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_2^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\ (3\cos^2\theta - 1) \\[2ex] Y_2^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\ e^{\pm i\varphi}\ \sin\theta\cos\theta \\[2ex] Y_2^{\pm2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\ e^{\pm 2i\varphi}\ \sin^2\theta \end{cases}$$

Debido a cómo hemos construido los armónicos esféricos satisfacen la siguiente relación de recurrencia:

$$e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m}{\tan\theta}\right) Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{l\,(l+1) - m\,(m\pm1)}\,Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)$$

También se puede comprobar que se satisface la siguiente relación de recurrencia entre distintos valores de l:

$$\cos\theta\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l+m+1)\,(l-m+1)}{(2l+1)\,(2l+3)}}\, Y_{l+1}^m(\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{(l+m)\,(l-m)}{(2l+1)\,(2l-1)}}\, Y_{l-1}^m(\theta,\varphi)$$

Por último, se puede demostrar que cualquier función de θ y de φ se puede desarrollar en serie de los armónicos esféricos, ya que de hecho verifican la siguiente relación de cierre:

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta',\varphi') = \delta\,(\cos\theta - \cos\theta')\ \delta\,(\varphi-\varphi')$$