Capítulo 11. La suma de los momentos angulares

11. La suma de los momentos angulares

La presencia de diferentes tipos de momento angular, orbital y de espín, y más de una partícula produce un momento angular total, sumado vectorialmente. Debido a que las componentes del momento angular no conmutan entre sí, no es posible determinar todas las componentes de la suma de los vectores y, por esta razón, es necesario contar con un método para sumar momentos angulares.

Sean $\vec{J}_1$ y $\vec{J}_2$ dos momentos angulares, el momento angular total es la suma de ambos,

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 , \tag{11.1}$$

en donde los operadores de las partes conmutan, $\left[\vec{J}_1, \vec{J}_2\right] = 0$, debido a que actúan sobre diferentes coordenadas. Como consecuencia, el momento angular total también conmuta con sus partes, $\left[\vec{J}, \vec{J}_i\right] = 0$.

Para identificar a las funciones propias del momento angular total es necesario contar con un conjunto de operadores que conmuten, ya que estas funciones deben ser funciones propias de dichos operadores. Normalmente se consideran dos opciones.

El conjunto de operadores de los momentos angulares individuales, $\left\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{13}, \hat{J}_{23}\right\}$, tiene como kets propios a $\left|j_1, j_2; m_1, m_2\right\rangle$, que consiste en el producto directo del conjunto de kets propios de cada operador individual. A este conjunto de kets se le denomina la base desacoplada.

La segunda opción consiste en tomar a los operadores $\left\{\hat{J}^2, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_z\right\}$. Estos operadores tienen los siguientes kets propios, $\left|j\, j_1 j_2 m_j\right\rangle$, y se les llama la base acoplada.

Es importante mencionar que ambos conjuntos de kets forman una base del mismo espacio vectorial y, por tanto, son matemáticamente equivalentes. Sin embargo, una base puede ser mas cómoda que otra para alguna aplicación particular.

Los kets de la base desacoplada, $\left|D\right\rangle = \left|j_1 m_1; j_2 m_2\right\rangle$, cumplen con las siguientes propiedades,

$$\hat{J}_i^2 \left| D \right\rangle = j_i \left(j_i + 1 \right) \hbar^2 \left| D \right\rangle, \qquad \hat{J}_{i3} \left| D \right\rangle = m_i \hbar \left| D \right\rangle, \tag{11.2}$$

mientras que para los kets de la base acoplada, $\left| A \right\rangle \equiv \left| j j_1 j_2 m_j \right\rangle$,

$$\hat{J}^2 \left| A \right\rangle = j \left(j + 1 \right) \hbar^2 \left| A \right\rangle, \qquad \hat{J}_i^2 \left| A \right\rangle = j_i \left(j_i + 1 \right) \hbar^2 \left| A \right\rangle, \qquad \hat{J}_z \left| A \right\rangle = m_j \hbar \left| A \right\rangle. \tag{11.3}$$

11.1. Los valores propios

Para determinar los valores propios del momento angular total es necesario analizar con más detalle ambos conjuntos. Dado que el momento angular total es la suma vectorial de los momentos individuales, entonces

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{13} + \hat{J}_{23}. \tag{11.4}$$

Si se aplica este operador sobre un ket de la base desacoplada se tiene que

$$\hat{J}_z \left| D \right\rangle = \left(m_1 + m_2 \right) \hbar \left| D \right\rangle = m_j \hbar \left| D \right\rangle. \tag{11.5}$$

Así, $m_j = m_1 + m_2$ y

$$\left(m_j \right)_{\max} = \left(m_1 \right)_{\max} + \left(m_2 \right)_{\max} = j_1 + j_2, \quad \left(m_j \right)_{\min} = \left(m_1 \right)_{\min} + \left(m_2 \right)_{\min} = -\left(j_1 + j_2 \right). \tag{11.6}$$

Por lo tanto, el valor más grande de j que se puede obtener es

$$j_{\max} = j_1 + j_2, \tag{11.7}$$

y los valores de m_j que se observan son

$$m_j = -\left(j_{\max} \right), \ldots, j_{\max} = -\left(j_1 + j_2 \right), \ldots, j_1 + j_2. \tag{11.8}$$

Para determinar el valor mínimo de j es necesario conocer el número de kets que hay en la base desacoplada. Como estos kets provienen de un producto directo,

$$\left| D \right\rangle = \left| j_1 j_2 m_1 m_2 \right\rangle = \left| j_1 m_1 \right\rangle \left| j_2 m_2 \right\rangle, \tag{11.9}$$

entonces hay $n = \left(2 j_1 + 1 \right) \left(2 j_2 + 1 \right)$ kets en la base desacoplada. Este es el mismo número de kets que hay en la base acoplada, puesto que son una base del mismo espacio vectorial. Por lo que

$$n = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} \left(2j+1\right). \tag{11.10}$$

Al igualar ambas expresiones y resolver para $j_{\min}$, se tiene que $j_{\min} = \left|j_1 - j_2\right|$. Así,

$$\left|j_1 - j_2\right| \le j \le j_1 + j_2 . \tag{11.11}$$

11.2. Las funciones propias

Dado que ambos conjuntos de kets forman una base del mismo espacio, los kets de la base acoplada son una combinación lineal de la base desacoplada,

$$\left| j\, j_1 j_2 m_j \right\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{j,m_j}_{m_1 m_2}\left(j_1, j_2\right)\left| j_1, j_2; m_1, m_2 \right\rangle , \tag{11.12}$$

en donde los coeficientes son proyecciones,

$$C^{j,m_j}_{m_1 m_2}\left(j_1, j_2\right) = \left\langle j_1 j_2; m_1 m_2 \right| j\, j_1 j_2 m_j \big\rangle , \tag{11.13}$$

y se denominan coeficientes de Clebsh-Gordan o símbolos $3j$. Estos coeficientes garantizan que los kets de la base acoplada sean kets propios de los operadores $\left\{J^2, J_1^2, J_2^2, J_z\right\}$. A continuación se muestran algunos ejemplos en donde se calculan estos coeficientes.

11.3. Ejemplo. El momento angular total de un átomo hidrogenoide

En un átomo hidrogenoide, el momento angular total del electrón es la suma de su momento angular orbital y el de espín, $s = \frac{1}{2}$,

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{L} + \hat{S}\right)^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}} + \hat{S}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_3\hat{S}_3 + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ ,$$

$$\hat{J}_z = \hat{L}_3 + \hat{S}_3 . \tag{11.14}$$

En general, los kets de la base acoplada satisfacen la ecuación de valores propios

$$\left(\frac{\hat{J}^2}{\hbar^2}\right)\left| jlsm_j \right\rangle = j\left(j+1\right)\left| jlsm_j \right\rangle , \tag{11.15}$$

por lo que, al sustituir la ecuación (11.12) en la (11.15) y proyectar, se tiene que

$$\sum_{m,m_s} C^{j,m_j}_{m,m_s}(l,s)\left\langle ls;m',m'_s\left|\frac{\hat{J}^2}{\hbar^2}\right|ls;m,m_s\right\rangle = j(j+1)C^{j,m_j}_{m',m'_s}(l,s), \tag{11.16}$$

o bien,

$$\sum_{m,m_s} C^{j,m_j}_{m,m_s}(l,s)\left(J^2\right)_{m',m'_s;m,m_s} = j(j+1)C^{j,m_j}_{m',m'_s}(l,s). \tag{11.17}$$

Usando la notación matricial, la ecuación anterior se puede escribir en la forma siguiente,

$$\tilde{J}^2\vec{C} = j(j+1)\vec{C}. \tag{11.18}$$

En este caso, la matriz de momento angular total contiene los elementos

$$\begin{aligned}\left(J^2\right)_{m',m'_s;m,m_s} &= \left\langle ls;m',m'_s\left|\frac{\hat{J}^2}{\hbar^2}\right|ls;m,m_s\right\rangle \\ &= l(l+1)\delta_{m,m'}\delta_{m_s,m'_s} + s(s+1)\delta_{m,m'}\delta_{m_s,m'_s} + 2mm_s\delta_{m,m'}\delta_{m_s,m'_s} \\ &\quad+\sqrt{(l-m+1)(l+m)(s+m_s+1)(s-m_s)}\,\delta_{m-1,m'}\delta_{m_s+1,m'_s} \\ &\quad+\sqrt{(l+m+1)(l-m)(s-m_s+1)(s+m_s)}\,\delta_{m+1,m'}\delta_{m_s-1,m'_s}\end{aligned}. \tag{11.19}$$

En forma similar,

$$\left(\frac{\hat{J}_z}{\hbar}\right)\left|jlsm_j\right\rangle = m_j\left|jlsm_j\right\rangle, \tag{11.20}$$

y para las componentes,

$$\sum_{m,m_s} C^{j,m_j}_{m_1m_s}(l,s)\left\langle ls;m',m'_s\left|\frac{\hat{J}_z}{\hbar}\right|ls;m,m_s\right\rangle = m_jC^{j,m_j}_{m',m'_s}(l,s), \tag{11.21}$$

esto es,

$$\sum_{m,m_s} C^{j,m_j}_{m_1m_s}(l,s)(m+m_s)\delta_{m,m'}\delta_{m_s,m'_s} = (m'+m_s)C^{j,m_j}_{m',m'_s}(l,s), \tag{11.22}$$

por lo tanto

$$\left[m_j-(m+m_s)\right]C^{j,m_j}_{m_1m_s}(l,s) = 0. \tag{11.23}$$

Entonces, cuando

$$m_j = m + m_s\,. \tag{11.24}$$

el coeficiente puede ser distinto de cero, mientras que,

$$C^{j,m_j}_{m,m_s}(l,s) = 0\,, \qquad (m_j \neq m + m_s). \tag{11.25}$$

Adicionalmente, algunos coeficientes son cero aún cuando la condición $m_j = m + m_s$ se cumple. El valor de todos los coeficientes se obtiene de la solución de la ecuación (12.18), para cada uno de los valores de j en el intervalo $|l-s| \le j \le l+s$.

Para determinar a todos los coeficientes es necesario aplicar la condición de normalización. Así,

$$1 = \langle jlsm_j | jlsm_j \rangle = \sum_{m,m_s} \left| C^{j,m_j}_{m,m_s}(l,s) \right|^2 = \vec{C} \cdot \vec{C} = \sum_{m_s} \left| C^{j,m_j}_{m_j - m_s, m_s}(l,s) \right|^2 . \tag{11.26}$$

Los orbitales *s*

Para los orbitales tipo *s*, $l = 0$ y $s = \frac{1}{2}$, la matriz del momento angular total toma la forma

		(m,m_s)	
	$\tilde{J}^2$	$\left(0,\frac{1}{2}\right)$	$\left(0,-\frac{1}{2}\right)$
(m',m'_s)	$\left(0,\frac{1}{2}\right)$	$\frac{3}{4}$	0
	$\left(0,-\frac{1}{2}\right)$	0	$\frac{3}{4}$

Observe que en este caso $\tilde{J}^2$ es diagonal en la base desacoplada, por lo tanto

$$j(j+1) = \tfrac{3}{4}\,, \tag{11.27}$$

y $j = j_{\max} = j_{\min} = \frac{1}{2}$. Adicionalmente,

$$\left|\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left|Y_{00}\alpha\right\rangle, \qquad \left|\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left|Y_{00}\beta\right\rangle. \tag{11.28}$$

Los orbitales *p*

En este caso, $l=1$ y $s=\frac{1}{2}$, y la matriz del momento angular queda en la forma

$\tilde{J}^2$	$(1,\frac{1}{2})$	$(1,-\frac{1}{2})$	$(0,\frac{1}{2})$	$(0,-\frac{1}{2})$	$(-1,\frac{1}{2})$	$(-1,-\frac{1}{2})$
$(1,\frac{1}{2})$	$\frac{15}{4}$	0	0	0	0	0
$(1,-\frac{1}{2})$	0	$\frac{7}{4}$	$\sqrt{2}$	0	0	0
$(0,\frac{1}{2})$	0	$\sqrt{2}$	$\frac{11}{4}$	0	0	0
$(0,-\frac{1}{2})$	0	0	0	$\frac{11}{4}$	$\sqrt{2}$	0
$(1,\frac{1}{2})$	0	0	0	$\sqrt{2}$	$\frac{7}{4}$	0
$(-1,-\frac{1}{2})$	0	0	0	0	0	$\frac{15}{4}$

Los valores propios de j corresponden con los valores propios de la matriz.

$$\begin{aligned}\left|\tilde{J}^2-x\tilde{I}\right| &= \left(\tfrac{15}{4}-x\right)^2\left[\left(\tfrac{7}{4}-x\right)\left(\tfrac{11}{4}-x\right)-2\right]^2 \\ &= \left(\tfrac{15}{4}-x\right)^2\left(\tfrac{77}{16}-\tfrac{9}{2}x+x^2-2\right)^2=\left(\tfrac{15}{4}-x\right)^2\left[x^2-2\tfrac{9}{4}x+\tfrac{45}{16}\right]^2 \\ &= \left(\tfrac{15}{4}-x\right)^2\left[x^2-2\tfrac{9}{4}x+\left(\tfrac{9}{4}\right)^2-\tfrac{81}{16}+\tfrac{45}{16}\right]^2 \\ &= \left(\tfrac{15}{4}-x\right)^2\left(x-\tfrac{9}{4}-\tfrac{6}{4}\right)^2\left(x-\tfrac{9}{4}+\tfrac{6}{4}\right)^2=\left(x-\tfrac{15}{4}\right)^4\left(x-\tfrac{3}{4}\right)^2\end{aligned} \quad . \tag{11.29}$$

Así, $j=\frac{1}{2},\frac{3}{2}$. Por lo que los valores de j cumplen con la condición

$$l+s=\tfrac{3}{2}\geq j\geq\left|l-s\right|=\tfrac{1}{2}, \tag{11.30}$$

Resolviendo primero para $j=\frac{3}{2}$, se tiene que, cuando $m_j=\frac{3}{2}$, el único coeficiente distinto de cero es

$$c_1\equiv C_{1,1/2}^{3/2,3/2}\left(1,\tfrac{1}{2}\right), \tag{11.31}$$

entonces

$$\vec{C}=c_1\left[1,0,0,0,0,0\right]=\left[1,0,0,0,0,0\right], \tag{11.32}$$

y

$$\left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left|11;\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left|Y_{11}\alpha\right\rangle . \tag{11.33}$$

Para $m_j = \frac{1}{2}$, sólo dos coeficientes sobreviven,

$$c_2 \equiv C^{3/2,1/2}_{1,-1/2}\left(1,\tfrac{1}{2}\right), \qquad c_3 \equiv C^{3/2,1/2}_{0,1/2}\left(1,\tfrac{1}{2}\right). \tag{11.34}$$

Así,

$$\tilde{J}^2\vec{C} = \tilde{J}^2\left[0,c_2,c_3,0,0,0\right] = \tfrac{15}{4}\vec{C} , \tag{11.35}$$

que equivale al sistema de ecuaciones

$$\tfrac{7}{4}c_2 + \sqrt{2}c_3 = \tfrac{15}{4}c_2, \qquad \sqrt{2}c_2 + \tfrac{11}{4}c_3 = \tfrac{15}{4}c_3, \tag{11.36}$$

por lo que $c_3 = \sqrt{2}c_2$, entonces

$$\vec{C} = c_2\left[0,1,\sqrt{2},0,0,0\right], \qquad \left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\left|Y_{11}\beta\right\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|Y_{01}\alpha\right\rangle , \tag{11.37}$$

y

$$C^{3/2,1/2}_{1,-1/2}\left(1,\tfrac{1}{2}\right) = \tfrac{1}{\sqrt{3}}, \qquad C^{3/2,1/2}_{0,1/2}\left(1,\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\tfrac{2}{3}} . \tag{11.38}$$

En forma similar,

$$\left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|Y_{10}\beta\right\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\left|Y_{1-1}\alpha\right\rangle , \qquad \left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}-\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left|Y_{1,-1}\beta\right\rangle ,$$

$$\left|\tfrac{1}{2}1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|Y_{11}\beta\right\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\left|Y_{10}\alpha\right\rangle , \qquad \left|\tfrac{1}{2}1\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\left|Y_{10}\beta\right\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|Y_{1,-1}\alpha\right\rangle . \tag{11.39}$$

Como ambos conjuntos forman una base del mismo espacio vectorial, entonces ambas están relacionadas a través de una transformación lineal,

$$\begin{bmatrix} \left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}\right\rangle \\ \vdots \\ \left|\tfrac{3}{2}1\tfrac{1}{2}-\tfrac{3}{2}\right\rangle \\ ----- \\ \left|\tfrac{1}{2}1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\tfrac{1}{2}1\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C^{3/2,3/2}_{1,1/2} & C^{3/2,3/2}_{1,-1/2}\cdots & C^{3/2,3/2}_{-1,-1/2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ C^{3/2,-3/2}_{1,1/2} & \cdots & C^{3/2,-3/2}_{-1,-1/2} \\ ---- & ----- & ---- \\ C^{1/2,1/2}_{1,1/2} & \cdots & C^{1/2,1/2}_{-1,-1/2} \\ C^{1/2,-1/2}_{1,1/2} & \cdots & C^{1/2,-1/2}_{-1,-1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left|11;\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle \\ \left|11;\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle \\ \vdots \\ \left|1-1;\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle \end{bmatrix}, \tag{11.40}$$

esto es,

$$\vec{X}_{aco} = \tilde{C}\vec{X}_{des}, \tag{11.41}$$

o bien,

$$\vec{X}_{aco} = \begin{bmatrix} \left| j_{\max} j_1 j_2 j_{\max} \right\rangle \\ \vdots \\ \left| j_{\min} j_1 j_2 - j_{\min} \right\rangle \end{bmatrix} = \tilde{C} \begin{bmatrix} \left| j_1 j_1 ; j_2 j_2 \right\rangle \\ \vdots \\ \left| j_1 - j_1 ; j_2 - j_2 \right\rangle \end{bmatrix}. \tag{11.42}$$

Observe que los renglones de la matriz $\tilde{C}$ son los vectores propios de $\hat{J}^2$ y $\hat{J}_z$,

$$\tilde{C}\left(l=1, s=\tfrac{1}{2}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1/3} & \sqrt{2/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/3} & \sqrt{1/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\sqrt{2/3} & \sqrt{1/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{1/3} & -\sqrt{2/3} & 0 \end{bmatrix}. \tag{11.43}$$

Siguiendo el mismo procedimiento, para los orbitales *d*, se obtiene la matriz de los coeficientes de Clebsh-Gordan,

$$\tilde{C}\left(2, \tfrac{1}{2}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1/5} & \sqrt{4/5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/5} & \sqrt{3/5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3/5} & \sqrt{2/5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4/5} & \sqrt{1/5} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\sqrt{4/5} & \sqrt{1/5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3/5} & \sqrt{2/5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/5} & -\sqrt{3/5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{1/5} & -\sqrt{4/5} & 0 \end{bmatrix}. \tag{11.44}$$