

Operadores tensoriales y teorema de Wigner-Eckart

En este capítulo veremos qué se entiende en mecánica cuántica por operadores escalares, vectoriales y tensoriales. Estas definiciones, análogamente al caso clásico, se basan en cómo se transforman los operadores frente a rotaciones. En particular, presentaremos la familia de operadores tensoriales esféricos irreducibles, que tienen reglas de transformación ante rotaciones muy particulares y análogas a las de los armónicos esféricos. La clasificación de operadores que daremos será particularmente útil pues nos permitirá enunciar el teorema de Wigner-Eckart, el cual establece reglas de selección para los elementos de matriz de operadores tensoriales esféricos en la base autoestados de momento angular, y encuentra aplicación en una amplia variedad de áreas de la mecánica cuántica, como por ejemplo para el cálculo transiciones atómicas por absorción y emisión de radiación. Algunas de estas aplicaciones veremos al final del capítulo y también con mucho más detalle en los capítulos sobre teoría de perturbaciones.

14.1. Repaso de nociones de mecánica clásica: vectores, escalares y tensores cartesianos

Primero que nada, repasemos muy brevemente las definiciones clásicas de vectores y tensores, para así luego justificar las definiciones que daremos para operadores en el caso cuántico.

Clásicamente decimos que una dada magnitud conformada por tres componentes, $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$, es un *vector* si ante una rotación R del sistema de coordenadas,

esta magnitud se transforma de la forma

$$\vec{V} \xrightarrow{R} \vec{V}' = R \vec{V}, \quad (14.1)$$

o, en términos de componentes,

$$V_i \xrightarrow{R} V'_i = \sum_j R_{ij} V_j. \quad (14.2)$$

Por supuesto, la posición \vec{r} es un vector, pues justamente la matriz de rotación se define precisamente para que $\vec{r}' = R\vec{r}$. Casos no triviales de vectores en mecánica clásica son, por ejemplo, el momento lineal \vec{p} , el momento angular \vec{L} , el campo eléctrico \vec{E} y magnético \vec{B} , entre muchos otros.

Por otro lado, en mecánica clásica decimos que una dada magnitud K es un *escalar* si ante rotaciones del sistema de coordenadas permanece invariante, es decir

$$K \xrightarrow{R} K' = K. \quad (14.3)$$

Un ejemplo de escalar es claramente la norma de un vector, como lo es la coordenada radial r en esféricas, pues es invariante ante rotaciones. Más en general, es fácil verificar que si \vec{V} y \vec{W} son dos vectores, entonces el producto interno $\vec{V} \cdot \vec{W}$ es un escalar.

Finalmente, un tensor cartesiano es una generalización directa del concepto de un vector. Decimos que una magnitud conformada por $3n$ componentes, T_{i_1, i_2, \dots, i_n} ($i_j = 1, 2, 3; j = 1, \dots, n$), es un *tensor cartesiano* de rango n si ante rotaciones se transforma de la forma

$$T_{i_1, i_2, \dots, i_n} \xrightarrow{R} T'_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} R_{i_1 j_1} R_{i_2 j_2} \dots R_{i_n j_n} T_{j_1, j_2, \dots, j_n}. \quad (14.4)$$

Es decir que cada índice del tensor T se transforma como un vector. Una forma de construirse un tensor es, por ejemplo, la siguiente: dados dos vectores \vec{V} y \vec{W} definimos $T_{ij} \equiv V_i W_j$. Claramente, esto es un tensor cartesiano de rango 2. Ejemplos clásicos de tensores son el tensor de esfuerzos, el tensor de inercia, el tensor electromagnético, el momento cuadrupolar, entre muchos otros.

14.2. Operadores Escalares, Vectoriales y Tensoriales Cartesianos

A continuación definiremos los conceptos de operadores vectoriales, escalares y tensoriales. Las definiciones serán una adaptación directa de las definiciones clásicas. Como vimos en capítulos anteriores, la acción de una rotación $R_{\vec{e}_n}(\phi)$ alrededor de un eje \vec{e}_n en un ángulo ϕ se representa en el espacio de Hilbert mediante un operador unitario

$$D(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = e^{-\frac{i\phi}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{e}_n}, \quad (14.5)$$

donde \vec{J} son los operadores de momento angular. Ante una rotación, un estado cualquiera $|\psi\rangle$ se transforma en un nuevo estado $|\psi'\rangle$ dado por

$$|\psi\rangle \xrightarrow{R_{\vec{e}_n}(\phi)} |\psi'\rangle = D(R_{\vec{e}_n}(\phi))|\psi\rangle. \quad (14.6)$$

Luego, dado un observable A cualquiera, ante una rotación del estado el valor medio cambia según

$$\langle A \rangle \xrightarrow{R_{\vec{e}_n}(\phi)} \langle A \rangle' = \langle \psi' | A | \psi' \rangle = \langle \psi | D^\dagger(R_{\vec{e}_n}(\phi)) A D(R_{\vec{e}_n}(\phi)) | \psi \rangle. \quad (14.7)$$

Por lo tanto, de forma análoga a cómo hemos hecho antes, podemos asociar la transformación del valor de expectación a una transformación del observable A . Efectivamente, decimos entonces que ante una rotación $R_{\vec{e}_n}(\phi)$, un operador cualquiera A se transforma en un nuevo operador A' dado por

$$A \xrightarrow{R_{\vec{e}_n}(\phi)} A' = D^\dagger(R_{\vec{e}_n}(\phi)) A D(R_{\vec{e}_n}(\phi)). \quad (14.8)$$

Las definiciones de operadores escalares, vectoriales y tensoriales serán una extensión directa del análogo clásico sobre la regla de transformación del operador A . De hora en más para aligerar la notación, notaremos la matriz de rotación $R_{\vec{e}_n}(\phi)$ simplemente como R , dando por sobre entendido el eje \vec{e}_n y el ángulo ϕ .

14.2.1. Operadores vectoriales

Dado un conjunto de tres operadores $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$, decimos que \vec{V} es un *operador vectorial* si ante una rotación R los operadores V_i transforman de la forma

$$V_i \xrightarrow{R} V'_i = D^\dagger(R) A D(R) = \sum_j R_{ij} V_j. \quad (14.9)$$

Notemos que la definición efectivamente es una adaptación directa de la definición clásica, donde pedimos que las componentes del operador vectorial transformen exactamente de la misma forma en que transforman las componentes de vectores en \mathbb{R}^3 .

Veremos a continuación algunos ejemplos de magnitudes que clásicamente son vectores y también lo son en mecánica cuántica con esta definición, manteniendo por lo tanto la idea intuitiva de vector. Pero, antes de proceder a los ejemplos, notemos que la definición (14.9), no obstante ser bastante clara desde un punto de vista conceptual, resulta extremadamente poco práctica de verificar, dado que el cálculo que implica es en general no trivial de realizar. Sin embargo, afortunadamente tenemos una definición equivalente de operador vectorial que es general mucho más fácil de verificar. Efectivamente, como (14.9) debe valer para toda rotación, en particular debe valer para una rotación infinitesimal $\delta\phi$. En tal caso, como vimos en el capítulo de transformaciones, el operador de rotación es

$$D(R_{\vec{e}_n}(\delta\phi)) = I - \frac{i\delta\phi}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{e}_n. \quad (14.10)$$

Por otro lado, como se ve en mecánica clásica, para una rotación en un ángulo infinitesimal un vector se transforma como

$$R_{\vec{e}_n}(\delta\phi)\vec{V} = \vec{V} + \delta\phi\vec{e}_n \wedge \vec{V}. \quad (14.11)$$

Luego, igualando estas dos expresiones es un ejercicio sencillo ver que entonces necesariamente debe ser

$$[J_k, V_l] = i\hbar\epsilon_{klm}V_m. \quad (14.12)$$

Luego, verificar que \vec{V} es un operador vectorial es equivalente a verificar que se satisfagan estas reglas de conmutación entre el operador y los generadores del momento angular.

Pasemos ahora sí a algunos ejemplos. En primer lugar, para que la definición de operador vectorial tenga algún contacto con la noción clásica de vector, por lo menos, el operador posición \vec{r} debería ser un vector. Veamos que esto efectivamente es así. El generador de las rotaciones que tenemos que considerar es el momento angular orbital \vec{L} y entonces

$$\begin{aligned} [L_k, r_l] &= [\epsilon_{kst}r_s p_t, r_l] = \epsilon_{kst} [r_s p_t, r_l] = \epsilon_{kst} r_s [p_t, r_l] \\ &= \epsilon_{kst} r_s (-i\hbar\delta_{tl}) = -i\hbar\epsilon_{kst}\delta_{tl}r_s = -i\hbar\epsilon_{ksl}r_s = i\hbar\epsilon_{kls}r_s, \end{aligned} \quad (14.13)$$

donde usamos que dos componentes distintas del operador posición conmutan ($[r_i, r_j] = 0$), que componentes distintas de posición y momento conmutan ($[r_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}$) y que el tensor de Levi-Chivita es antisimétrico ($\epsilon_{ksl} = -\epsilon_{kls}$). Luego, \vec{r} satisface (14.12) y por lo tanto el operador posición es efectivamente un operador vectorial. Análogamente se puede mostrar que el operador momento \vec{p} también es un operador vectorial, como es de esperar. Finalmente, como tercer ejemplo veamos qué pasa con el momento angular \vec{J} . En este caso (14.12) se reduce a $[L_k, L_l] = i\hbar\epsilon_{klm}L_m$, lo cual es trivialmente cierto pues esta es la definición de un operador de momento angular. Luego, los operadores de momento angular son trivialmente operadores vectoriales.

Antes de pasar a las siguientes definiciones, veamos ya una aplicación de esto. En el capítulo de dinámica se mencionó como ejemplo la precesión de un espín 1/2 en presencia de un campo magnético. En tal caso, teníamos un Hamiltoniano

$$H = -\gamma\vec{S} \cdot \vec{B} \quad (14.14)$$

con \vec{S} los operadores de espín y \vec{B} el campo magnético. En el capítulo de dinámica se escribieron las ecuaciones de Heisenberg a resolver para encontrar la evolución temporal de $\vec{S}_H(t)$. Sin embargo, veamos que esto es trivial con nuestra definición de operador vectorial. Efectivamente, si $\vec{B} = B_0\vec{e}_n$ (con \vec{e}_n un versor de norma unidad), el operador de evolución temporal es

$$U(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}H} = e^{\frac{iB_0\gamma t}{\hbar}\vec{e}_n \cdot \vec{J}} = D(R_{\vec{e}_n}(-B_0\gamma t)), \quad (14.15)$$

que, como notamos, no es más que el operador de rotación en la dirección del campo magnético en un ángulo $\phi(t) = -B_0\gamma t$. Por lo tanto, el operador de espín en la representación de Heisenberg es

$$\vec{S}_H(t) = D^\dagger \left(R_{\vec{e}_n}(-B_0\gamma t) \right) \vec{S} D \left(R_{\vec{e}_n}(-B_0\gamma t) \right) = R_{\vec{e}_n}(-B_0\gamma t) \vec{S}. \quad (14.16)$$

Como vimos en el capítulo de dinámica, obtenemos que el operador de espín precece alrededor del campo magnético con una frecuencia $\omega = B_0\gamma$, pero ahora sin necesidad de resolver ninguna ecuación diferencial. Más aún, este análisis se puede extender de forma inmediata al problema de un espín de cualquier dimensión en presencia de un campo magnético uniforme.

14.2.2. Operadores escalares

Pasemos ahora a discutir la definición de un operador escalar. Diremos que un dado operador K es un *operador escalar* si ante rotaciones permanece invariante, es decir

$$K \xrightarrow{R} K' = D^\dagger(R) K D(R) = K. \quad (14.17)$$

En este caso es muy sencillo verificar que esto es cierto si y sólo si el operador K conmuta con los operadores de momento angular,

$$[J_i, K] = 0. \quad (14.18)$$

Como vimos en el capítulo de momento angular, un ejemplo de un operador que satisface (14.18) es el momento angular cuadrado J^2 . Esto también está en acuerdo con su contraparte clásica en cuanto es como el “módulo cuadrado” de un vector. Efectivamente, esta idea se puede generalizar. Supongamos que \vec{V} y \vec{W} son dos operadores vectoriales, entonces el operador $\vec{V} \cdot \vec{W} = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$ es un operador escalar. Efectivamente,

$$\begin{aligned} [J_k, \vec{V} \cdot \vec{W}] &= [J_k, V_l W_l] = [J_k, V_l] W_l + V_l [J_k, W_l] \\ &= i\hbar \varepsilon_{klm} V_m W_l + i\hbar \varepsilon_{klm} V_l W_m = i\hbar \varepsilon_{klm} V_m W_l + i\hbar \varepsilon_{kml} V_m W_l \\ &= i\hbar \varepsilon_{klm} V_m W_l - i\hbar \varepsilon_{klm} V_m W_l = 0, \end{aligned} \quad (14.19)$$

donde usamos que por hipótesis \vec{V} y \vec{W} son operadores vectoriales (y por lo tanto satisfacen (14.12)), en la última igualdad del segundo renglón renombramos los índices $l \leftrightarrow m$ y finalmente usamos que el tensor de Levi-Chivita es antisimétrico. Nuevamente recuperamos propiedades que también valían clásicamente. En particular, una consecuencia de este resultado es que el módulo cuadrado de cualquier operador vectorial es escalar y, luego, el operador r (asociado a la coordenada radial en coordenadas esféricas) es un operador escalar.

14.2.3. Tensores Cartesianos

Finalmente, un conjunto de $3n$ operadores $\{T_{i_1, \dots, i_n}, i_j = 1, 2, 3, j = 1, \dots, n\}$ forman un *tensor cartesiano* de rango n si ante rotaciones se transforman de la forma

$$T_{i_1, i_2, \dots, i_n} \xrightarrow{R} T'_{i_1, i_2, \dots, i_n} = D^\dagger(R) T_{i_1, i_2, \dots, i_n} D(R) = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} R_{i_1 j_1} R_{i_2 j_2} \dots R_{i_n j_n} T_{j_1, j_2, \dots, j_n}. \quad (14.20)$$

Como en el caso clásico, si \vec{V} y \vec{W} son dos vectores, entonces claramente $T_{ij} = V_i W_j$ define un tensor cartesiano de rango 2. De la misma forma es sencillo construirse tensores cartesianos de rango n usando n vectores. Los casos de operadores vectoriales y escalares están contenidos como casos particulares de la definición de operador tensorial cartesiano, correspondiendo a los casos de un operador tensorial de rango 1 y 0, respectivamente.

14.3. Tensores Esféricos Irreducibles

A continuación veremos otra familia de operadores tensoriales, los tensores esféricos irreducibles. Estos operadores serán de particular interés para nosotros pues ante rotaciones se comportan de forma muy particular, permitiendo dar reglas de selección, en la forma del teorema de Wigner-Eckart, para los elementos de matriz de estos operadores en la base de autoestados de momento angular.

Para ganar un poco de intuición sobre la utilidad en definir esta nueva familia de operadores, volvamos a considerar los operadores tensoriales cartesianos que definimos en la sección anterior. Dados dos operadores vectoriales \vec{V} y \vec{W} , podemos definir el tensor de rango 2, $T_{ij} = V_i W_j$. Notemos que este tensor cartesiano se puede reescribir de la siguiente forma

$$\begin{aligned} T_{ij} = V_i W_j &= \frac{1}{3} \vec{V} \cdot \vec{W} \delta_{ij} + \frac{1}{2} (V_i W_j - V_j W_i) + \frac{1}{2} (V_i W_j + V_j W_i - \frac{2}{3} \vec{V} \cdot \vec{W} \delta_{ij}) \\ &= \text{Tr}[T] + T_{ij}^A + T_{ij}^S, \end{aligned} \quad (14.21)$$

donde $\text{Tr}[T]$ es la traza del tensor, $T_{ij}^A = (T_{ij} - T_{ji})/2$ es la parte antisimétrica del tensor y $T_{ij}^S = (T_{ij} + T_{ji} - 2\text{Tr}[T]/3)/2$ y es la parte simétrica (de traza nula). Esta descomposición del tensor cartesiano es notable, pues según la definición (14.20) las componentes del tensor cartesiano se mezclan todas entre sí ante una rotación. Sin embargo, cada uno de los términos en esta expresión (14.21) se transforma de forma distinta ante rotaciones y no se mezclan entre sí. Efectivamente, usando la

regla de transformación de cada operador vectorial \vec{V} y \vec{W} es sencillo verificar que

$$\text{Tr}[T'] = \vec{V}' \cdot \vec{W}' = \vec{V} \cdot \vec{W} = \text{Tr}[T], \quad (14.22)$$

$$(T_{ij}^A)' = \sum_{ij} R_{ik} R_{jl} \frac{1}{2} (V_i W_j - V_j W_i) = \frac{1}{2} (T'_{ij} - T'_{ji}) = (T'_{ij})^A, \quad (14.23)$$

$$(T_{ij}^S)' = \sum_{ij} R_{ik} R_{jl} \frac{1}{2} \left(V_i W_j + V_j W_i - \frac{1}{3} \vec{V} \cdot \vec{W} \delta_{ij} \right) = \sum_{ij} \frac{1}{2} \left(T'_{ij} + T'_{ji} - \frac{1}{3} \text{Tr}[T'] \delta_{ij} \right) = (T'_{ij})^S. \quad (14.24)$$

Luego, cada uno de los operadores $\text{Tr}[T]$, T_{ij}^A y T_{ij}^S se transforma de forma diferente ante rotaciones y las componentes no se mezclan nunca entre estos tres operadores. En particular, por ejemplo, la traza del tensor T , que no es más que el producto interno entre los vectores \vec{V} y \vec{W} , es un escalar y no se mezcla con ninguna otra componente. Por otro lado, la parte antisimétrica, tiene claramente 3 grados de libertad (es una matriz antisimétrica de 3×3), mientras que la parte simétrica de traza nula tiene 5 grados de libertad. Luego, el tensor cartesiano $T_{ij} = V_i W_j$ se puede descomponer en términos de tres conjuntos de 1, 3 y 5 operadores tales que frente a rotaciones se mezclan dentro de cada conjunto, pero no entre conjuntos diferentes. Notemos que esta descomposición es muy similar a lo que teníamos cuando veíamos la suma de dos momentos angulares $j_1 = j_2 = 1$, donde ahora el espacio total se separa en tres subespacios irreducibles ante las rotaciones, correspondientes a momento angular total $j = 0, 1, 2$ y cuyas dimensiones respectivas son 1, 3, 5.

Todo esto motiva la definición de operadores tensoriales *irreducibles* ante rotaciones, en el sentido que las componentes del tensor se mezclan entre sí ante rotaciones, pero es imposible descomponerlos en subconjuntos que no se mezclan entre sí, a diferencia de lo que sucedía con los tensores cartesianos. Los operadores que satisfacen esto son los *tensores esféricos*. Formalmente, dado un conjunto de $2k + 1$ operadores $\{T_q^{(k)}, q = -k, -k + 1, \dots, k - 1, k\}$, decimos que forman un *tensor esférico* de rango k si ante rotaciones transforman como

$$T_q^{(k)} \xrightarrow{R} T'_q{}^{(k)} = D^\dagger(R) T_q^{(k)} D(R) = \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)}(R^{-1}) T_{q'}^{(k)}, \quad (14.25)$$

con $D_{q'q}^{(k)}(R^{-1})$ los elementos de matriz del operador de rotación en la base de momento angular total $j = k$ y proyecciones $m, m' = q, q'$, es decir

$$D_{q'q}^{(k)}(R) = \langle kq' | D(R) | kq \rangle. \quad (14.26)$$

Por lo tanto, a diferencia de los tensores cartesianos, las componentes de un tensor esférico se mezclan multiplicando por coeficientes que no están dados por la matriz de rotación, sino que por los elementos de matriz del operador unitario que representa la acción de la rotación en el espacio de Hilbert. Más aún, como vimos en el capítulo de momento angular, los tensores esféricos se transforman ante

rotaciones exactamente de la misma forma que transforman los armónicos esféricos. Efectivamente, por completitud, recordemos que los armónicos esféricos, que son las autofunciones del operador de momento angular orbital, son funciones complejas de la variable real posición \vec{r} tal que ante una rotación $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = R\vec{r}$, se transforman como

$$Y_l^m(\vec{r}) \xrightarrow{R} Y_l^m(\vec{r}') = Y_l^m(R\vec{r}) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) Y_l^{m'}. \quad (14.27)$$

Efectivamente, los tensores esféricos transforman exactamente de la misma forma que los armónicos esféricos.

De forma análoga a los casos anteriores, mirando rotaciones infinitesimales se puede mostrar que la condición (14.25) es equivalente a las siguientes reglas de conmutación

$$\left[J_z, T_q^{(k)} \right] = \hbar q T_q^{(k)}, \quad \left[J_{\pm}, T_q^{(k)} \right] = \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}. \quad (14.28)$$

Notemos que las condiciones (14.28) recuerdan mucho a la acción de los operadores J_z y J_{\pm} sobre los estados de momento angular $|k, q\rangle$.

Como veremos más adelante, estos operadores resultarán esenciales para dar reglas de selección sencillas en la base de autoestados de momento angular. Antes de pasar esto, sin embargo, cabe discutir cómo podemos construir operadores que son tensores esféricos irreducibles. Para ello en primer lugar veremos cómo construir un tensor esférico a partir de un vector y luego mostraremos una fórmula general para construir tensores esféricos de rango arbitrario.

14.3.1. Reescritura de un operador vectorial como tensor esférico de rango 1

En primer lugar veamos cómo, dado un operador vectorial $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$ podemos definir un tensor esférico irreducible. Como un vector tiene 3 componentes independientes, esperamos poder construir un tensor esférico de rango 1. Definamos

$$V_0^{(1)} \equiv V_z, \quad V_{\pm 1}^{(1)} \equiv \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}. \quad (14.29)$$

Veamos que efectivamente $V_q^{(1)}$ definen un tensor esférico de rango 1. Para ello tenemos que ver que satisfacen (14.28). Para $q = 0$ tenemos

$$\left[J_z, V_0^{(1)} \right] = [J_z, V_z] = 0, \quad (14.30)$$

donde usamos que \vec{V} es un operador vectorial y por lo tanto satisface (14.12). Para $q = \pm 1$ tenemos

$$\begin{aligned}
\left[J_z, V_{\pm 1}^{(1)} \right] &= \left[J_z, \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}} \right] = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{[J_z, V_x]}_{\substack{i\hbar\varepsilon_{zxy}V_y \\ \text{por (14.12)}}} \pm i \underbrace{[J_z, V_y]}_{\substack{i\hbar\varepsilon_{zyx}V_x \\ \text{por (14.12)}}} \right) \\
&= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i\hbar\varepsilon_{zxy}V_y \pm ii\hbar\varepsilon_{zyx}V_x \right) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i\hbar V_y \pm \hbar V_x \right) \\
&= \mp \hbar \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\pm V_x + i\hbar V_y \right) = \begin{cases} -\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x + i\hbar V_y) = \hbar V_{+1}^{(1)}, & (q = +1) \\ \hbar \frac{1}{\sqrt{2}} (-V_x + i\hbar V_y) = -\hbar V_{-1}^{(1)}, & (q = -1) \end{cases} \\
&= \pm \hbar V_{\pm 1}^{(1)}. \tag{14.31}
\end{aligned}$$

Por lo tanto se satisfacen las reglas de conmutación (14.28) con J_z . De forma análoga se pueden verificar las reglas de conmutación con J_{\pm} para así concluir que efectivamente (14.29) definen un tensor esférico de rango 1.

14.3.2. Regla de composición de tensores esféricos

En la sección anterior vimos cómo construir un tensor esférico de rango 1 a partir de un vector. Queda la pregunta de cómo armarnos tensores esféricos de mayor rango. A continuación veremos un resultado formal que nos permite hacer esto.

Sean $V^{(k_1)}$ y $W^{(k_2)}$ dos tensores esféricos de rango k_1 y k_2 , respectivamente. Entonces, se puede mostrar que los operadores $T_q^{(k)}$ dados por

$$T_q^{(k)} \equiv \sum_{q_1, q_2} \langle k_1, k_2; q_1, q_2 | k, q \rangle V_{q_1}^{(k_1)} W_{q_2}^{(k_2)}, \tag{14.32}$$

definen un tensor esférico de rango k . La demostración de esto es inmediata de calcular $D^\dagger(R)T_q^{(k)}D(R)$ y usar que $V^{(k_1)}$ y $W^{(k_2)}$ satisfacen (14.25). Notar que en (14.32) $\langle k_1, k_2; q_1, q_2 | k, q \rangle$ son simplemente los coeficientes de Clebsch-Gordan que provienen de acoplar momentos angulares k_1 y k_2 con proyecciones q_1 y q_2 para obtener un momento angular total k con proyección q . Por lo tanto, debido a las reglas de selección de los coeficientes de Clebsch-Gordan, esto nos dice dos cosas importantes.

- Dados los tensores de rango k_1 y k_2 , solamente nos podremos construir tensores de rango $k = |k_1 - k_2|, |k_1 - k_2| + 1, \dots, k_1 + k_2 - 1, k_1 + k_2$. Por ejemplo, si tenemos dos tensores de rango 1, entonces nos podremos construir tensores de rango $k = 0, 1, 2$. Notemos que esta es exactamente la misma regla de sumas de momentos angulares.

- En (14.32) en realidad no hay dos sumatorias porque los valores posibles de q_1 y q_2 están restringidos por la condición $q_1 + q_2 = q$ para que el coeficiente de Clebsch-Gordan sea no nulo. Es decir que para construir la componente q de $T^{(k)}$ solamente tenemos que sumar sobre las combinaciones de q_1 y q_2 que satisfagan $q = q_1 + q_2$.

Ejemplo: construcción de un tensor esférico de rango 2 a partir de dos vectores

Veamos ahora como ejemplo de aplicación de (14.32) cómo construimos un tensor de rango 2 a partir de dos vectores \vec{V} y \vec{W} . Como vimos en (14.29), dado un vector nos podemos construir un tensor de rango 1. Podemos entonces usar estos dos tensores de rango 1 y (14.32) para construimos uno de rango 2, es decir

$$T_q^{(2)} = \sum_{\substack{q_1, q_2 \in \{1, 0, -1\} \\ q_1 + q_2 = q}} \langle 1, 1; q_1, q_2 | 2, q \rangle V_{q_1}^{(1)} W_{q_2}^{(1)}, \quad (14.33)$$

con $V^{(1)}$ y $W^{(2)}$ dados por (14.29).

Por ejemplo, para $q = 0$ tenemos

$$\begin{aligned} T_0^{(2)} &= \sum_{\substack{q_1, q_2 \in \{1, 0, -1\} \\ q_1 + q_2 = 0}} \langle 1, 1; q_1, q_2 | 2, 0 \rangle V_{q_1}^{(1)} W_{q_2}^{(1)} \\ &= \underbrace{\langle 1, 1; 0, 0 | 2, 0 \rangle V_0^{(1)} W_0^{(1)}}_{\sqrt{2/3}} + \underbrace{\langle 1, 1; 1, -1 | 2, 0 \rangle V_1^{(1)} W_{-1}^{(1)}}_{\sqrt{1/6}} + \underbrace{\langle 1, 1; -1, 1 | 2, 0 \rangle V_{-1}^{(1)} W_1^{(1)}}_{\sqrt{1/6}} \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} V_z W_z - \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{1}{2} (V_x + iV_y)(W_x - iW_y) - \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{1}{2} (V_x - iV_y)(W_x + iW_y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} (3V_z W_z - \vec{V} \cdot \vec{W}). \end{aligned} \quad (14.34)$$

Análogamente procedemos para las otras componentes, para así obtener que el tensor de rango 2 que nos construimos a partir de dos vectores \vec{V} y \vec{W} es

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (3V_z W_z - \vec{V} \cdot \vec{W}). \quad (14.35)$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} (V_x W_x - V_y W_y \pm iV_x W_y \pm iV_y W_x). \quad (14.36)$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \mp \frac{1}{2} (V_x W_z + V_z W_x \pm iV_y W_z \pm iV_z W_y). \quad (14.37)$$

En el caso particular en que $\vec{W} = \vec{V}$ y las componentes de \vec{V} conmutan entre sí,

esto se reduce a

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (3V_z^2 - V^2). \quad (14.38)$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} (V_x^2 - V_y^2 \pm 2iV_x V_y). \quad (14.39)$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \mp (V_x V_z \pm iV_y V_z). \quad (14.40)$$

14.4. Teorema de Wigner-Eckart

Pasamos ahora a ver una de las aplicaciones más útiles de los tensores esféricos: el teorema de Wigner-Eckart y las reglas de selección que éste impone.

Dado un operador tensorial esférico de rango k , $T^{(k)}$, sea $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ una base de autoestados de un CCOC $\{A, J^2, J_z\}$, con A cualquier observable que conmuta con J^2 y J_z (por ejemplo, en el átomo de Hidrógeno, A puede ser el Hamiltoniano H). Entonces, el teorema de Wigner-Eckart nos dice que los elementos de matriz del operador $T_q^{(k)}$ en esta base de momento angular se pueden escribir de la forma

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \langle j, k; m, q | j', m' \rangle T_{\alpha', \alpha}^{k, j', j}, \quad (14.41)$$

donde $\langle j, k; m, q | j', m' \rangle$ es el coeficiente de Clebsch-Gordan que surge de sumar momentos angulares j y k con proyecciones m y q para obtener un momento angular total j' con proyección m' ; y $T_{\alpha', \alpha}^{k, j', j}$ es un coeficiente que depende de α , α' , j , j' y k , pero notablemente *no* depende de m , m' ni q . Es decir que el teorema de Wigner-Eckart nos dice que la dependencia en m , m' y q del elemento de matriz de $T_q^{(k)}$ se puede factorizar totalmente en un coeficiente de Clebsch-Gordan. A la constante $T_{\alpha', \alpha}^{k, j', j}$ se la suele notar como

$$T_{\alpha', \alpha}^{k, j', j} = \langle \alpha', j' || T^{(k)} || \alpha, j \rangle \quad (14.42)$$

y denominar “elemento de matriz reducido” de $T^{(k)}$. Cabe notar que esta desafortunada notación es muy propensa al engaño, en cuanto es similar a la notación que usamos para elementos de matriz, pero aquí no hay ningún ket, ni bra, ni operador, ni elemento de matriz; es simplemente notación para la constante que no depende de m , m' ni q . Efectivamente, este coeficiente no se puede calcular de forma directa; su definición es literalmente el teorema de Wigner-Eckart y si uno quiere saber cuanto vale tiene que primero calcular el elemento de matriz de $T_q^{(k)}$ y luego dividir por el correspondiente coeficiente de Clebsch-Gordan (esto lo veremos más claro luego en ejemplos concretos).

El hecho que en el teorema de Wigner-Eckart (14.41) aparezca un coeficiente de Clebsch-Gordan es notable, en cuanto nos da restricciones muy fuertes sobre

los valores de j , j' , m y m' para que el elemento de matriz de $T_q^{(k)}$ sea distinto de cero. Efectivamente para que

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \neq 0, \quad (14.43)$$

necesariamente

$$\langle j, k; m, q | j', m' \rangle \neq 0, \quad (14.44)$$

y para que este coeficiente de Clebsch-Gordan sea distinto de cero se tienen que cumplir las condiciones

$$m + q = m', \quad |j - k| \leq j' \leq j + k, \quad (14.45)$$

(donde como siempre los valores posibles de j' van saltando de a una unidad). Cualquier elemento de matriz que viole cualquiera de las condiciones (14.45) es automáticamente cero.

14.4.1. Reglas de selección para operadores escalares

Veamos una primer aplicación del teorema de Wigner-Eckart al caso más sencillo, el de un tensor esférico de rango 0, es decir un escalar K . Supongamos que nos interesan los elementos de matriz del operador escalar K en una base de autoestados de momento angular $\{|\alpha, j, m\rangle\}$. Luego, por el teorema de Wigner-Eckart (con $k = q = 0$) tenemos que

$$\langle \alpha', j', m' | K | \alpha, j, m \rangle = \langle j, 0; m, 0 | j', m' \rangle K_{\alpha', \alpha}^{j', j}, \quad (14.46)$$

En particular, por las reglas de selección impuestas por los coeficientes de Clebsch-Gordan antes mencionadas, para que estos elementos de matriz sean distintos de cero necesariamente $m = m'$ y $j' = j$. Por lo tanto, un operador escalar nunca puede tener elementos de matriz cruzados con distintos números cuánticos de momento angular total j ni proyección m . Esto no debería sorprendernos, en cuanto ser un operador escalar equivale a conmutar con los operadores de momento angular.

14.4.2. Reglas de selección para operadores vectoriales

Consideremos ahora que tenemos un operador vectorial \vec{V} y nos interesa calcular los elementos de matriz de \vec{V} en una base de autoestados de momento angular $\{|\alpha, j, m\rangle\}$, $\langle \alpha', j', m' | V_i | \alpha, j, m \rangle$. A simple vista podría no parecer claro cómo vamos a emplear el teorema de Wigner-Eckart, dado que no tenemos un operador tensorial esférico. Sin embargo, como mostramos antes, dado un operador vectorial, nos podemos construir un tensor esférico de rango 1. Por supuesto, esta relación (14.29) la podemos invertir para escribir las componentes del vector como combinación lineal de tensores esféricos

$$V_z = V_0^{(1)}, \quad V_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{-1}^{(1)} - V_1^{(1)}), \quad V_y = \frac{i}{\sqrt{2}} (V_{-1}^{(1)} + V_1^{(1)}). \quad (14.47)$$

Luego, para la componente z tenemos

$$\langle \alpha', j', m' | V_z | \alpha, j, m \rangle = \langle \alpha', j', m' | V_0^{(1)} | \alpha, j, m \rangle = \langle j, 1; m, 0 | j', m' \rangle V_{\alpha', \alpha}^{j', j}. \quad (14.48)$$

Para que estos elementos de matriz no sean nulos, necesariamente $m = m'$ y $j' = j - 1, j, j + 1$. Por lo tanto, el operador V_z tiene elementos de matriz distintos de cero solamente entre subespacios de momento angular total que difiere a lo sumo en una unidad mientras que no conecta estados con distinta proyección m .

Por otro lado, para V_x tenemos

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j', m' | V_x | \alpha, j, m \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \alpha', j', m' | V_{-1}^{(1)} | \alpha, j, m \rangle - \langle \alpha', j', m' | V_{+1}^{(1)} | \alpha, j, m \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} V_{\alpha', \alpha}^{j', j} (\langle j, 1; m, -1 | j', m' \rangle - \langle j, 1; m, +1 | j', m' \rangle). \end{aligned} \quad (14.49)$$

Por lo tanto, para que los elementos de matriz de V_x sean distintos de cero, $j' = j - 1, j, j + 1$ y ya sea $m' = m + 1$ o $m' = m - 1$ (notemos que los dos coeficientes de Clebsch-Gordan nunca pueden ser ambos distintos de cero). Nuevamente, el operador V_x tiene elementos de matriz distintos de cero solamente entre subespacios de momento angular total que difieren en a lo sumo una unidad (efectivamente eso está determinado por el rango del tensor), mientras que ahora conecta estados que difieren en la proyección z en ± 1 .

Un comportamiento totalmente análogo al de V_x se tendrá para V_y . Efectivamente,

$$\langle \alpha', j', m' | V_y | \alpha, j, m \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} V_{\alpha', \alpha}^{j', j} (\langle j, 1; m, -1 | j', m' \rangle + \langle j, 1; m, +1 | j', m' \rangle), \quad (14.50)$$

y las reglas de selección serán las mismas que para V_x . Sin embargo, cabe destacar un hecho notable adicional. Como en el teorema de Wigner-Eckart la constante $V_{\alpha', \alpha}^{j', j}$ no depende de la componente q del tensor, es la *misma* tanto para V_x como para V_y y V_z . Por lo tanto, como los coeficientes de Clebsch-Gordan son conocidos, sabiendo cuánto vale el elemento de matriz de alguna de las tres componentes V_i , sabemos automáticamente cuánto vale el elemento de matriz de las otras dos.

Para fijar ideas sobre la utilidad de estos resultados, consideremos el átomo de Hidrógeno, donde tenemos el CCOC $\{H, L^2, L_z\}$ con su respectiva base $\{|n, l, m\rangle\}$. Supongamos que nos interesa calcular los elementos de matriz del operador de posición \vec{r} entre todos los estados del electrón en las capas $2p$ ($n = 2, l = 1$) y $3d$ ($n = 3, l = 2$), es decir,

$$\langle 3, 2, m' | r_i | 2, 1, m \rangle. \quad (14.51)$$

Como veremos en detalle al estudiar teoría de perturbaciones, el cálculo de este tipo de elementos de matriz será esencial para determinar qué transiciones entre niveles de energía son posibles en el átomo debido a la interacción dipolar con un

campo eléctrico externo. En este caso particular, tenemos que $m = -1, 0, 1$, mientras que $m' = -2, -1, 0, 1, 2$. Tenemos además las tres componentes del operador posición $r_i = x, y, z$. Por lo tanto, en principio, el cálculo de todos estos elementos de matriz parecería involucrar el cálculo de 45 integrales sobre todo el espacio. Sin embargo, el teorema de Wigner-Eckart nos permite, en primer lugar, determinar por argumentos de simetría que muchos (la mayoría) de estos elementos de matriz se anulan. Efectivamente, por lo antes discutido, los únicos elementos de matriz de z que pueden llegar a ser no nulos son aquellos tales que $m = m'$ y estos son en total 3 posibilidades ($m = m' = -1, 0, 1$). A su vez, tanto para x como para y solamente sobreviven elementos de matriz con $m' = m \pm 1$, lo cual nos da 16 posibilidades. Luego, de los 45 elementos de matriz, solamente 19 de ellos pueden ser no nulos. Más aún, como discutimos antes, al estar mirando elementos de matriz con $\alpha = 2, \alpha' = 3, j = 1, j' = 2$ fijos, el coeficiente que aparece en el teorema de Wigner-Eckart es siempre el mismo y, por lo tanto, conociendo uno de estos 19 elementos de matriz, conocemos todos los otros. De esta forma, calculando (o midiendo) una única de estas integrales, tenemos todas las otras simplemente multiplicando por coeficientes de Clebsch-Gordan.