Al resolver la ecuación de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno, se necesita saber algunas cosas de los llamados *armónicos esféricos*. Posiblemente no te hayan aparecido en el grado, esencialmente sirven para desarrollar por Fourier funciones que viven en la esfera unidad S^2. Dedicamos esta hoja a lo que necesitas saber de ellos. Es un tema duro si se ve en toda su amplitud y por tanto nos saltaremos algunas cosas. Los físicos suelen utilizar para introducirlos propiedades del momento angular y teoría de representaciones pero eso nos llevaría demasiado tiempo.

Llamaremos $\mathcal{P}$ al espacio de polinomios en tres variables x, y, z. Recuerda que se dice que $P \in \mathcal{P}$ es *homogéneo* si todos sus monomios tienen el mismo grado, por ejemplo $x^3+3xyz+2z^3$ es homogéneo y x^2+y^2+x no lo es. Recuerda (o aprende) que $P \in \mathcal{P}$ es *armónico* si $\Delta P = 0$ con Δ el operador laplaciano $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$.

El resultado básico que vamos a emplear es

$$L^2(S^2) = \widehat{\bigoplus_{l=0}^{\infty}} \mathcal{E}_l \tag{1}$$

donde $\mathcal{E}_l$ representa las restricciones a S^2 de los $P \in \mathcal{P}$ armónicos y homogéneos de grado l unión con el cero (para que sea un espacio vectorial). El símbolo ˆ indica que hay que tomar el completado pero si no lo entiendes, te puedes olvidar de ello. La parte fundamental es probar que toda $f \in L^2(S^2)$ se puede aproximar tan bien como queramos por combinaciones de elementos de los $\mathcal{E}_l$. Te cuento los pasos para deducir esto. Refleja lo que quieras sobre ello en tu trabajo.

- Las funciones continuas son densas en $L^2(S^2)$, por tanto se puede suponer f continua.
  Expl. Esto es un conocido teorema [Rud87] de espacios L^p.
- f se puede extender a F continua en la bola cerrada unidad.
  Expl. Por ejemplo, usando coordenadas esféricas, se puede tomar $F = rf(\theta, \varphi)$.
- F se puede aproximar uniformemente en la bola cerrada unidad por polinomios de $\mathcal{P}$.
  Expl. También es un conocido teorema, un caso particular del de Stone-Weierstrass. Seguramente te han contado al menos el caso de dimensión 1.
- Todo $P \in \mathcal{P}$ es combinación lineal de polinomios homogéneos.
  Expl. Muy fácil.
- Todo $P \in \mathcal{P}$ homogéneo es combinación lineal de polinomios armónicos multiplicados por potencias de $x^2+y^2+z^2$.
  Expl. Esto sale con álgebra lineal pero es un poco largo de explicar. Te digo un ejemplo: Si $P = x^2+y^2+xz+2017z^2$, entonces $P = 672H_1 + H_2 + 673(x^2+y^2+z^2)H_3$ con $H_1 = -x^2-y^2+2z^2$, $H_2 = xz$ y $H_3 = 1$, que son armónicos.

Si quieres saber más, no conozco buenas referencias para (1). La que más me gusta es un capítulo de un libro de teoría de números [Iwa97]. En internet he visto [Tah15] que tiene buena pinta. En general, el tema de los armónicos esféricos está en el texto clásico [CH53] pero no me parece muy completo.

1) [Solo para ver si lo has entendido] Prueba que $\{xy, xz, yz, x^2-z^2, x^2-y^2, x^2+y^2+z^2\}$ es una base de los polinomios homogéneos de grado dos (y el cero). Todos son armónicos excepto el último. Deduce de ello el último punto para todo P de grado 2.

Para lo que sigue, es fundamental separar en el laplaciano la parte que depende del radio y la parte que depende de los ángulos. Concretamente, hay que saber que al cambiar a coordenadas esféricas, el laplaciano se escribe como

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta^* \qquad \text{con} \quad \Delta^* = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{2}$$

Este cambio de variables es una cuenta larga pero, por favor, convéncete de que sabrías hacerla con la regla de la cadena si dedicaras suficiente tiempo a ello. Aquí Δ^* es la parte que no depende del radio y se considera que es el laplaciano en S^2. Al estudiar el átomo de hidrógeno aparecen las autofunciones de Δ^* y ellas son los armónicos esféricos después de normalizarlas adecuadamente.

Sea f definida en S^2 autofunción de Δ^* con autovalor λ, esto es, $\Delta^* f = \lambda f$. Por (1) sabemos que $f = \sum_{l=0}^\infty e_l$ para ciertos $e_l \in \mathcal{E}_l$ donde $e_l = P_l\big|_{S^2}$ con P_l polinomio armónico homogéneo de grado l o $e_l = 0$.

2) Prueba que de $\Delta P_l = 0$ y $\Delta^* f = \lambda f$ se sigue $\sum \big(l(l+1)+\lambda\big)e_l = 0$. Indicación: En esféricas, $P_l(r,\theta,\varphi) = r^l e_l(\theta,\varphi)$ y $f(\theta,\varphi) = \sum e_l(\theta,\varphi)$; utiliza esto para hallar $\Delta \sum P_l$ con (2). Da por hecho siempre, sin justificarlo, que no hay problemas de convergencia (se sigue de la teoría general).

3) Usando que (1) es una suma directa, deduce que $\sum \big(l(l+1)+\lambda\big)e_l = 0$ implica que todos los sumandos deben ser cero y de aquí que $\lambda = -l(l+1)$ para algún $l \ge 0$ entero. Observación: Por definición de autofunción $f \neq 0$ por tanto no todos los e_l son nulos.

En definitiva, hemos probado que si $\Delta^* f = \lambda f$, con $f \neq 0$, entonces necesariamente $\lambda = -l(l+1)$ y f es la restricción de un polinomio armónico homogéneo de grado l. El razonamiento también funciona en la otra dirección, así que $\mathcal{E}_l$ es exactamente el subespacio de autofunciones de autovalor $-l(l+1)$. Por ejemplo,

$$\mathcal{B}_0 = \{1\}, \qquad \mathcal{B}_1 = \{x, y, z\} \qquad \text{y} \qquad \mathcal{B}_2 = \{xy, xz, yz, x^2-z^2, x^2-y^2\},$$

son bases de los polinomios armónicos homogéneos de grados 0, 1 y 2 (unión con el cero para que sean subespacios), entonces las bases en esféricas de autofunciones de Δ^* con autovalores $-0\cdot 1$, $-1\cdot 2$ y $-2\cdot 3$ son $\mathcal{B}'_0=\{1\}$, $\mathcal{B}'_1=\{\cos\varphi\operatorname{sen}\theta, \operatorname{sen}\varphi\operatorname{sen}\theta, \cos\theta\}$ y

$$\mathcal{B}'_2=\{\operatorname{sen}\varphi\cos\varphi\operatorname{sen}^2\theta, \cos\varphi\operatorname{sen}\theta\cos\theta, \operatorname{sen}\varphi\operatorname{sen}\theta\cos\theta, \cos^2\varphi\operatorname{sen}^2\theta-\cos^2\theta, \cos^2\varphi\operatorname{sen}^2\theta-\operatorname{sen}^2\varphi\operatorname{sen}^2\theta\}.$$

Para grados mayores, hallar una base $\mathcal{B}_l$ de los polinomios armónicos homogéneos de grado l llevaría un buen rato y $\mathcal{B}'_l$ contendría en general expresiones bien feas. Vamos a ver que hay una base con una estructura razonablemente simple.

Cada $P\in\mathcal{B}_l$ tiene suma de grados en x e y menor o igual que l. Si escribimos $\cos\varphi=(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})/2$ $\operatorname{sen}\varphi=(e^{i\varphi}-e^{-i\varphi})/2i$ en las fórmulas para x e y de esféricas, se sigue que cada elemento de $\mathcal{B}'_l$ será combinación lineal de expresiones de la forma

$$e^{im\varphi}P(\operatorname{sen}\theta, \operatorname{sen}\theta, \cos\theta) \qquad \text{con} \quad -l\le m\le l, \quad m\in\mathbb{Z} \tag{3}$$

donde $P\in\mathcal{P}$ es homogéneo de grado l. Se puede probar que aparecen todos los m en el rango indicado (aunque no lo haremos aquí). No es difícil ver que en $P(\operatorname{sen}\theta, \operatorname{sen}\theta, \cos\theta)$ las potencias de $\operatorname{sen}\theta$ difieren de m en un número par, ya que en las fórmulas de esféricas para x e y, $\operatorname{sen}\theta$ está acompañado por $\cos\varphi$ y $\operatorname{sen}\varphi$ que dan lugar a $e^{i\varphi}\pm e^{-i\varphi}$.

4) Explica (3) y la última afirmación.

Utilizando $\sin^2\theta=1-\cos^2\theta$ se llega a que los elementos de $\mathcal{B}'_l$ son combinaciones lineales de funciones del tipo

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\begin{cases} e^{im\varphi}Q(\cos\theta) & \text{si } m \text{ es par,}\\ e^{im\varphi}\operatorname{sen}\theta Q(\cos\theta) & \text{si } m \text{ es impar,}\end{cases} \qquad \text{con} \quad -l\le m\le l, \quad m\in\mathbb{Z}$$

y Q es un polinomio de una variable de grado l si m es par y de grado $l-1$ si es impar. Se suelen normalizar de manera que Q tenga coeficientes reales y se cumpla $\int_{S^2}|Y_{lm}|^2=1$ (se puede probar que esto determina Y_{lm} salvo el signo pero no lo haremos aquí). En ese caso se dice que son los *armónicos esféricos*. Al sustituir $f=\sum_{m=-l}^{l}c_mY_{lm}\in\mathcal{B}'_l$ en $\Delta^*f=-l(l+1)f$ y comparar los coeficientes (de Fourier) de los $e^{im\varphi}$ se deduce que los armónicos esféricos no solo generan las autofunciones sino que son también autofunciones.

5) Halla Y_{32} razonadamente salvo la constante normalizadora. Es decir, busca una función del tipo $f(\theta,\varphi)=e^{2i\varphi}Q(\cos\theta)$ con Q de grado 3 que cumpla $\Delta^*f=-3\cdot 4f$. Indicación: Para que no te eternices haciendo cálculos, da por hecho que si $F(\theta)=\cos^3\theta+a\cos^2\theta+b\cos\theta+c$, entonces $\frac{\partial^2F}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial F}{\partial\theta}+12F=6\cos\theta+a(6\cos^2\theta+2)+10b\cos\theta+12c$. Esto se sigue sin más que derivar y simplificar pero es un poco aburrido hacerlo.

Lo que me tienes que entregar. A lo más debe ocupar seis páginas pero intenta que sea bastante menos.

6) Considera el siguiente teorema: *En el problema $\Delta^* f = \lambda f$ los únicos autovalores posibles son $\lambda = -l(l+1)$ con $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ y para cada l una base de las autofunciones es $\{Y_{lm}\}_{m=-l}^{l}$ donde Y_{lm} es $e^{im\varphi}$ por un polinomio de grado l en $\cos\theta$ si m es par y $\operatorname{sen}\theta$ por un polinomio de grado $l-1$ en $\cos\theta$ si m es impar.* Enúncialo, cambiando las palabras a tu gusto o dividiéndolo en dos si quieres, y da la prueba con lo que has aprendido (salvo las lagunas que se dejan en esta hoja), indicando los pasos que te saltas. Ilustra el resultado con una tabla de Y_{lm} para $l = 0$ y $l = 1$ (cuatro funciones en total) que encuentres en la red o en un libro. Si tienes ganas y te sobra espacio, añade también las de $l = 2$. Nota que algunos autores llaman Y_l^m a lo que yo he llamado Y_{lm}.

Un comentario final. Después de esta hoja sobre todo con los cálculos del penúltimo ejercicio, posiblemente te preguntes si no existe una fórmula explícita para los Y_{lm}. La respuesta es sí, pero no es tan explícita como pudiera parecer a primera vista. Si tienes curiosidad, está por ejemplo en §XIII.9 de [Mes62]. Muchas veces se escribe de forma menos elemental en términos de lo que se llaman polinomios asociados de Legendre.

Referencias

[CH53] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of mathematical physics. Vol. I.* Interscience Publishers, Inc., New York, N.Y., 1953.

[Iwa97] H. Iwaniec. *Topics in classical automorphic forms*, volume 17 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1997.

[Mes62] A. Messiah. *Quantum mechanics. Vol. II.* Translated from the French by J. Potter. North-Holland Publishing Co., Amsterdam; Interscience Publishers, a division of John Wiley & Sons, Inc., New York, 1962.

[Rud87] W. Rudin. *Real and complex analysis.* McGraw-Hill Book Co., New York, third edition, 1987.

[Tah15] A. Taheri. *Function spaces and partial differential equations. Vol. 2*, volume 41 of *Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications*. Oxford University Press, Oxford, 2015. Contemporary analysis.