El momento angular en mecánica cuántica

Al igual que en mecánica clásica, el momento angular tiene una gran importancia en mecánica cuántica. Esta importancia se debe a que existe una ley de conservación asociada al momento angular. Por ejemplo, en un sistema aislado el momento angular se conserva, o bien, como otro ejemplo, cuando una partícula se mueve en un campo central también se conserva. En mecánica cuántica cuando una magnitud se conserva (es una constante del movimiento) es porque el operador asociado a dicha magnitud conmuta con el operador hamiltoniano. Por tanto, si el momento angular se conserva ya tendremos el hamiltoniano parcialmente diagonalizado si utilizamos una base de autofunciones del momento angular. En este tema vamos a analizar el operador momento angular y a resolver su ecuación de autovalores. Como veremos, las distintas componentes del momento angular no conmutan entre si, de modo que no se pueden medir simultáneamente. Además, tanto los autovalores de las componentes del momento angular como del módulo del momento angular son discretos, de modo que al medir el momento angular no podemos obtener cualquier valor.

El operador momento angular. Coordenadas esféricas.

En mecánica clásica el momento angular se define a partir del vetor de posición y la cantidad de movimiento como:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

En mecánica cuántica el momento angular vendrá representado por un operador y podemos definirlo a partir de los operadores de posición y cantidad de movimiento como:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

Es decir, que:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \qquad \text{y} \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z$$

Como se puede ver en estas ecuaciones no hace falta simetrizar ninguna expresión, ya que, por ejemplo en la expresión de $\hat{L}_x$, los operadores $\hat{y}$ y $\hat{p}_z$ conmutan, al igual que los operadores $\hat{z}$ y $\hat{p}_y$, de modo que las componentes del momento angular resultan ser operadores hermíticos. Podemos ver cómo actúan estos operadores en la representación coordenadas:

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_x \right| \psi \right\rangle = -i\hbar y \frac{\partial}{\partial z}\psi(\mathbf{r}) + i\hbar z \frac{\partial}{\partial y}\psi(\mathbf{r})$$

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_y \right| \psi \right\rangle = -i\hbar z \frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r}) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z}\psi(\mathbf{r})$$

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_z \right| \psi \right\rangle = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial y}\psi(\mathbf{r}) + i\hbar y \frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r})$$

Es más conveniente trabajar en coordenadas esféricas, ya que como veremos, las componentes del momento angular sólo actúan sobre las variables angulares θ y φ, pero no sobre la coordenada radial r. Las coordenadas esféricas se definen a partir de las cartesianas mediante las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi\sin\theta \\ y &= r\sin\varphi\sin\theta \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}$$

También conviene conocer las siguientes relaciones inversas:

$$\begin{aligned} r^2 &= x^2+y^2+z^2 \\ \cos^2\theta &= \frac{z^2}{x^2+y^2+z^2} \\ \tan\varphi &= \frac{y}{x} \end{aligned}$$

El elemento de volumen en coordenadas esféricas es $r^2\sin\theta\ drd\theta d\varphi$, de modo que dada una función de onda $\psi(r,\theta,\varphi)$, la probabilidad de encontrar a la partícula en el elemento de volumen anterior vendrá dada por la función:

$$|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\ r^2\sin\theta\ drd\theta d\varphi$$

De la misma forma, la condición de normalización en coordenadas esféricas vendrá dada por la siguiente integral:

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\ r^2\sin\theta\ drd\theta d\varphi=1$$

Vamos a escribir a continuación las componentes del operador momento angular en la representación coordenadas utilizando las coordenadas esféricas. Desarrollaremos explícitamente sólo la componente $\hat{L}_x$ ya que el resto se obtienen de forma similar. El operador $\hat{L}_x$ en la representación coordenadas se puede escribir como:

$$\left\langle \mathbf{r}\left|\hat{L}_x\right|\psi\right\rangle = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi(\mathbf{r})$$

Lo único que tenemos que pasar a coordenadas esféricas es el término que hay entre paréntesis. Este término se puede escribir de la siguiente forma utilizando la regla de la cadena:

$$r\cos\theta\left(\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)-r\sin\varphi\sin\theta\left(\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Vamos a calcular las diferentes derivadas parciales:
De la relación $r^2=x^2+y^2+z^2$, derivando parcialmente respecto de y obtenemos:

$$2r\frac{\partial r}{\partial y}=2y$$

por tanto:

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\varphi \sin\theta$$

De la relación $\cos^2\theta = z^2/\left(x^2+y^2+z^2\right)$, derivando parcialmente respecto de y obtenemos:

$$-2\cos\theta\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial y} = -\frac{2z^2y}{r^4} = -\frac{2}{r}\cos^2\theta\sin\varphi\sin\theta$$

por tanto:

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{1}{r}\sin\varphi\cos\theta$$

De la relación $\tan\varphi = y/x$, derivando parcialmente respecto de y obtenemos:

$$\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{x} = \frac{1}{r\cos\varphi\sin\theta}$$

por tanto:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}$$

Del mismo modo podemos obtener las derivadas parciales respecto de z. De la expresión de r^2, derivando parcialmente respecto de z obtenemos:

$$2r\frac{\partial r}{\partial z} = 2z = 2r\cos\theta \quad \text{y} \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta$$

De la expresión de $\cos^2\theta$, derivando parcialmente respecto de z:

$$-2\cos\theta\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{2z}{r^2} - \frac{2z^3}{r^4} = \frac{2z}{r^2}\left(1-\frac{z^2}{r^2}\right) = \frac{2}{r}\cos\theta\left(1-\cos^2\theta\right) = \frac{2}{r}\cos\theta\sin^2\theta$$

$$\text{y} \qquad \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{1}{r}\sin\theta$$

Por último, de la expresión de $\tan\varphi$, derivando parcialmente respecto de z, se obtiene que $\partial\varphi/\partial z = 0$.

Vamos a unir todos los resultados que hemos obtenido para expresar $\hat{L}_x$ en coordenadas esféricas. El término que había entre paréntesis era:

$$r\cos\theta\left(\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - r\sin\varphi\sin\theta\left(\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) =$$

Sustituimos todas las derivadas parciales que hemos calculado:

$$= r\cos\theta\left(\sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\sin\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) -$$

$$-r\sin\varphi\sin\theta\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Por tanto, la componente $\hat{L}_x$ en función de las coordenadas esféricas queda de la forma:

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_x \right| \psi \right\rangle = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi\left(r, \theta, \varphi\right)$$

Del mismo modo podemos expresar las componentes $\hat{L}_y$ y $\hat{L}_z$ en función de las coordenadas esféricas como:

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_y \right| \psi \right\rangle &= i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi\left(r, \theta, \varphi\right) \\ \left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_z \right| \psi \right\rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \psi\left(r, \theta, \varphi\right) \end{aligned}$$

Tal como dijimos anteriormente, las componentes del momento angular sólo actúan sobre las coordenadas angulares pero no sobre la coordenada radial r. En apartados posteriores resolveremos la ecuación de autovalores del momento angular.