Relaciones de conmutación del momento angular.

Vamos a calcular las relaciones de conmutación de las componentes del momento angular. Para calcular el conmutador de dos componentes del momento angular nos podemos basar en las reglas de conmutación de la posición y del momento. Comenzaremos calculando el conmutador entre los operadores $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right] = \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x\right] + \left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z\right] = \\ &= \hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{z}\right]\hat{p}_x + \hat{x}\left[\hat{z}, \hat{p}_z\right]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z\end{aligned}$$

De la misma forma se pueden demostrar las siguientes reglas de conmutación:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_z\right] = -i\hbar\hat{L}_y \qquad \text{y} \qquad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x$$

Estas reglas de conmutación se pueden escribir de forma más compacta utilizando el producto vectorial:

$$\left(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}}\right)_x = \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x$$

como el resto de las componentes verifican relaciones análogas podemos escribir que:

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}$$

Por tanto, de acuerdo con la relaciones anteriores, las componentes del momento angular no conmutan entre sí, de modo que no podemos medir simultáneamente las componentes del momento angular, ya que no podemos encontrar una base de autovectores conmunes a las tres componentes. Como máximo sólo podemos determinar una componente del momento angular. Existe una diferencia fundamental con la mecánica clásica, ya que en mecánica clásica una partícula lógicamente tiene determinadas las tres componentes del momento angular, de modo que si el momento angular se conserva tenemos tres constantes del movimiento que se pueden utilizar para simplificar el problema. En mecánica cuántica no ocurre así, ya que sólo podemos utilizar una de las tres componentes. Podemos buscar otro operador que sea una función de las componentes del momento angular y que conmute con ellas. El encontrar un operador de ese tipo nos serviría para diagonalizar parcialmente el hamiltoniano en el caso en que se conserve el momento angular.

De hecho, existe un operador de ese tipo y se trata del cuadrado del módulo del momento angular:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Vamos a ver las relaciones de conmutación entre este operador y las componentes del momento angular, Vamos a calcular su conmutador con la componente $\hat{L}_x$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] &= \left[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x\right] = \\ &= \hat{L}_y\left[\hat{L}_y, \hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_y, \hat{L}_x\right]\hat{L}_y + \hat{L}_z\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right]\hat{L}_z = \\ &= -i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z = 0\end{aligned}$$

Por tanto, los operadores $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_x$ conmutan, e igualmente $\hat{L}^2$ conmuta con las tres componentes del momento angular. De modo que aunque no podamos medir simultáneamente las tres componentes del momento angular, sí que podemos medir una componente y el módulo del momento angular simultáneamente. Por otro lado, cuando el momento angular sea una constate del movimiento, de modo que el hamiltoniano conmute con las componentes del momento angular, podremos encontrar una base de autovectores (autofunciones) comunes al hamiltoniano, a una componente del momento angular y al módulo del momento angular. Por tanto, el conocer las autofunciones comunes a una de las componentes del momento angular y al módulo del momento angular nos ayudará a diagonalizar el hamiltoniano cuando se conserve el momento angular.

Para terminar este apartado, vamos a obtener la expresión del operador $\hat{L}^2$ en la representación coordenadas utilizando las coordenadas esféricas. Aunque el cálculo en un poco tedioso lo vamos a desarrollar explícitamente, para lo cual vamos a calcular en primer lugar los operadores $\hat{L}_x^2$, $\hat{L}_y^2$ y $\hat{L}_z^2$:

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_x^2 \right| \psi \right\rangle = -\hbar^2 \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi(\mathbf{r}) =$$

$$= -\hbar^2 \left(\sin^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi} \right.$$
$$\left. + \frac{\cos^2\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi} - \frac{\cos\varphi\sin\varphi}{\tan^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos^2\varphi}{\tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \psi(\mathbf{r})$$

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_y^2 \right| \psi \right\rangle = -\hbar^2 \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi(\mathbf{r}) =$$

$$= -\hbar^2 \left(\cos^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\varphi\sin\varphi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\cos\varphi\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi} \right.$$
$$\left. + \frac{\sin^2\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{\tan^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin^2\varphi}{\tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \psi(\mathbf{r})$$

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}_z^2 \right| \psi \right\rangle = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi(\mathbf{r})$$

Cuando sumamos los tres operadores la mayoría de los términos se van, de modo que al final queda la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} \left| \hat{L}^2 \right| \psi \right\rangle &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \psi(\mathbf{r}) = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi^2} \right) \end{aligned}$$

Como se puede comprobar, el operador $\hat{L}^2$ se corresponde con la parte angular del laplaciano en coordenadas esféricas.