Revista Brasileira de Física, Vol. 10, N.° 3, 1980

Una Rapida y Sencilla Derivacion del Operador Cuadrado del Momento Angular en Coordenadas Curvilineas

FRANCISCO M. FERNÁNDEZ y EDUARDO A. CASTRO

Instituto de Investigaciones Fisicoqulmicas Teóricas y Aplicadas, Seccíon Química Teórica, Sucursal4 — Casilla de Correo 16, La Plata 1900, Argentina

Recebido em 1.° de Julho de 1979

Se busca resaltar, en el caso del operador "cuadrado del momento angular", la necesidad de independizar la descripciõn de los fenômenos físicos de las peculiaridades matemáticas del sistema de coordenadas que sirve para su descripciõn numérica. Esto naturalmente se logra cuando se trabaja tensorialmente en un sistema de coordenadas completamente general.

Procura-se ressaltar, no caso do operador "quadrado do momento", a necessidade de tornar a descrição dos fenômenos físicos independente das peculiaridades matemáticas do sistema de coordenadas que serve para sua descrição numérica. Consegue-se isso naturalmente quando se trabalha tensorialmente em um sistema de coordenadas completamente geral.

A menudo es conveniente en mecânica cuântica emplear la expresiõn de 10s operadores asociados a1 momento angular en términos de un sistema de coordenadas genera1. E1 procedimiento estándar para derivar tales operadores recurre a las fõrmulas de transformacion de coordenadas y la regla de la cadena de diferenciaciÕnlv2. Tal procedimiento es de uso extendido y clásico, pero a su vez es largo y tedioso. E1 10 trae como consecuencia que a menudo 10s docentes obvian tal derivaciõn. Se han presentado varios procedimientos para superar tal difi~ultad En~esta nota damos una derivación alternativa que constituye un método rápido y senci110 para e1 cálciilo en coordenadas curvi1ineas de1 cuadrado de1 operador momento angular, la cual creems puede ser de utilidad pedagógica en los cursos de mecánica cuántica. El &todo propuesto se halla estrechamente relacionado con los presentados en las Referencias 3 y 4 en el sentido de que en ambos casos se aplican elementos del cálculo tensorial. Pero nuestro procedimientoparte de la analogia entre el producto externo de dos contravectores y el producto vectorial tal como es definido en análisis vectorial elemental. El &todo seguido en las Referencias 3 y 4 se basa en las fórmulas útiles y usuales para las expresiones tensoriales de las operaciones de gradiente y divergencia[10].

El producto externo o general de dos contravectoresa^{i} y b^{k} se define por la expresiõn $a^{j}b^{k}$, donde j y k tomam todos los valores de los índices de las componentes del vector indicado[1]. Si se aplica el tensor absoluto ε_{ijk} al producto externo de dos contravectores, se obtiene

$$s_{i} = \varepsilon_{ijk}\, a^{j}b^{k} = (a^{2}b^{3} - a^{3}b^{2}, a^{3}b^{1} - a^{1}b^{3}, a^{1}b^{2} - a^{2}b^{1}) \qquad (1)$$

donde $\varepsilon_{ijk} = e_{ijk}\, g^{1/2}$; g es el determinante del cotensor métrico g_{km}; e_{ijk} es el símbolo completamente antisimétrico de triple índice de Levi-Civita, definido por

$$e_{ijk} = \begin{cases} +1 \text{ para una permutaciõn cíclica de los índices } ijk \\ -1 \text{ para una permutaciõn anticíclica de los índices } ijk \\ 0 \text{ para el caso que dos indices cualesquiera sean iguales} \end{cases}$$

s_{i} es el vector densidad de coordenadas (s_{1}, s_{2}, s_{3}). En el caso especial de coordenadas rectilineas, entonces $g = 1$ y $\varepsilon_{ijk} = e_{ijk}$.

De la Eq.(1) podemos ver que el vector densidad s_{i} tiene componentes identicas con aquellas que corresponden al vector producto vectorial $\vec{a}\times\vec{b}$ definido en análisis vectorial elemental.

Definiendo las nuevas cantidades

$$\beta_{ij} = \varepsilon_{kij}\, b^{k} \quad ; \quad \alpha_{ij} = \varepsilon_{kij}\, a^{k} \qquad (2)$$

podemos escribir la *Eq.* (1) como

$$(\vec{a}\times\vec{b})_i = \beta_{ij}\, a^j = \alpha_{ij}\, b^j \;;\; i = 1,\, 2,\, 3 \tag{3}$$

o, en forma matricial, como

$$(\vec{a}\times\vec{b}) = \beta a = -\,(\vec{b}\times\vec{a}) = -\,\alpha b = \alpha^t b \tag{4}$$

El operador momento angular se puede escribir en coordenadas curvilineas en la forma

$$L^i = \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \partial_k \tag{5}$$

donde x_j son las componentes del vector posición y ∂_k son las componentes del vector gradiente. Si anotamos con $\vec{e}_i$ a los covectores base, entonces el cuadrado del operador momento angular es

$$L^2 = L^i\, \vec{e}_i \cdot L^j\, \vec{e}_j \tag{6}$$

Pero

$$L^i\, \vec{e}_j = \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \partial_k\, \vec{e}_i = \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \vec{e}_i\, \partial_k - \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \partial_k(\vec{e}_i) \tag{7}$$

y

$$\partial_k(\vec{e}_i) = \Gamma^h_{ik}\, \vec{e}_h \tag{8}$$

donde Γ^h_{ik} es el símbolo de Christoffel de segunda clase. Reemplazando la Eq.(8) en la Eq.(7) se tiene

$$\begin{aligned} L^2 = \varepsilon^{ijk}\, x_j\, g_{is}\, \partial_k\, L^s - \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \Gamma^h_{ik}\, g_{hs}\, L^s = L^i L_i\; - \\ -\; \varepsilon^{ijk}\, x_j\, \Gamma_{isk}\, L^s \end{aligned} \tag{9}$$

con

$$g_{is} = \vec{e}_i \cdot \vec{e}_s \tag{10}$$

Como

$$\varepsilon^{ijk} = -\,\varepsilon^{kji} \quad \text{y} \quad \Gamma_{isk} = \Gamma_{ksi} \tag{11}$$

entonces

$$\varepsilon^{ijk}\,\Gamma_{isk} = 0 \tag{12}$$

y en consecuencia

$$L^2 = L^i\, L_i \tag{13}$$

De la Eq. (2) se puede escribir para el momento angular

$$\mathrm{L} = \alpha^t \nabla \tag{14}$$

donde

$$\alpha_{ij} = \varepsilon_{kij}\, r^{k} \tag{15}$$

$$L_i = \alpha_{ki}\, g^{k1}\, \partial_1 \tag{16}$$

$$L^i = g^{is}\, \alpha_{ks}\, g^{k1}\, \partial_1 \tag{17}$$

Reemplazando en la Eq. (13) por las Eqs.(16-17) nos queda finalmente

$$L^2 = -\hbar^2\, g^{is}\, \alpha_{ks}\, g^{k1}\, \partial_1\, \alpha_{ri}\, g^{rp}\, \partial_p \tag{18}$$

que es la fórmula buscada para la expressión del cuadrado del operador momento angular y cuya validez es general en el sentido de no depender del sistema de coordenadas.

A manera de ejemplo apliquemos la fórmula (18) para el caso de coordenadas esféricas.

$$\vec{x} = r\vec{r}$$

$$\alpha_{ij} = \varepsilon_{ijk}\, r^k = \begin{cases} \alpha_{23} = r g^{1/2} \\ \alpha_{32} = -\, r g^{1/2} \\ 0 \text{ en todo otro caso} \end{cases}$$

Entonces

$$L^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{r^2} r^3 \;\; \text{sen}\theta \; \frac{1}{r^2\;\text{sen}^2\theta} \; \partial_\phi \;\; \frac{1}{r^2\;\text{sen}^2\theta} \; r^3 \; \text{sen}\theta \; \partial_\phi \; + \right.$$

$$\left. + \; \frac{1}{r^2\;\text{sen}^2\theta} \; r^3 \; \text{sen}\theta \; \frac{1}{r^2} \; \partial_\theta \; r^3 \; \text{sen}\theta \; \frac{1}{r^2} \; \partial_\theta \right\} =$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\text{sen}\theta} \; \partial_\theta \;\; \text{sen}\theta \; \partial_\theta + \frac{1}{\text{sen}^2\theta} \;\; \partial^2_\theta \right\}$$

la cual constituye la bien conocida expresión del operador L^2 en coordenadas esféricas.

REFERENCIAS

1. L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica No-Relativista*, Reverté, Barcelona, 1967, pag. 99; *Mécanique Quantique*, MIR, Moscou, 1966, pg. 107.
2. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2nd. Edition, Wiley, New York, 1961, pag. 178.
3. D. P. Prato, Am. J. Phys., 45, 1003 (1977).
4. F. M. Fernández y E. A. Castro, *XIII Congreso Latinoamericano de Química*, 1978, pág. 17.
5. V. Namias, Am. J. Phys., 45, 773 (1977).
6. K. Srinivasan, Am. J. Phys., 45, 767 (1977).
7. J. N. Boyd, Am. J. Phys., 46, 586 (1978).
8. P. D. Gupta, Am. J. Phys., 44, 888 (1976).
9. Y. Hoshino, Am. J. Phys., 46, 1148 (1978).
10. A. Lichnerowicz, *Elementos de Cálculo Tensorial*, Aguilar, Madrid, 1962, pag. 115-120.
11. A. Kyrala, *Theoretical Physics: Applications of Vectors, Matrices, Tensors and Quaternions*, W. B. Saunders Co.; Philadelphia and London, 1967, Chapter 6.