Lidt om differentialoperatorer i sfæriske koordinater

Lad $f(x, y, z)$ være en vilkårlig differentiabel funktion af tre retvinklede koordinater. Vi betegner partielle afledede af f med et index:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \equiv f_x,$$

osv. Sammenhængen mellem retvinklede og sfæriske koordinater (se Griffiths, fig. 4.1) er:

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi \\ y &= r \sin\theta \sin\phi \\ z &= r \cos\theta. \end{aligned} \tag{1}$$

For at aflede f mht. r, θ eller ϕ må vi bruge kædereglen, dvs. differentiere gennem x,y og z. F. eks. er:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \sin\theta\cos\phi \cdot f_x + \sin\theta\sin\phi \cdot f_y + \cos\theta \cdot f_z = \frac{x}{r} f_x + \frac{y}{r} f_y + \frac{z}{r} f_z. \tag{2}$$

Tilsvarende er

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = r\cos\theta\cos\phi \cdot f_x + r\cos\theta\sin\phi \cdot f_y - r\sin\theta \cdot f_z, \tag{3}$$

og

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = -y f_x + x f_y. \tag{4}$$

Laplace-operatoren er i hhv. retvinklede og polære koordinater givet ved:

$$\triangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{5}$$

Vi vil vise dette ved at demonstrere, at begge differentialoperatorer gør det samme ved f. Metoden er 'brute force', dvs. bare kløø på: F. eks. følger fra (2), at

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = (\frac{x}{r})^2 f_{xx} + (\frac{y}{r})^2 f_{yy} + (\frac{z}{r})^2 f_{zz} + 2\frac{xy}{r^2} f_{xy} + 2\frac{xz}{r^2} f_{xz} + 2\frac{yz}{r^2} f_{yz}, \tag{6}$$

således at

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial f}{\partial r} &= r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial^2 r} + 2r\frac{\partial f}{\partial r} \\ &= x^2 f_{xx} + y^2 f_{yy} + z^2 f_{zz} + 2xy f_{xy} + 2xz f_{xz} + 2yz f_{yz} + 2x f_x + 2y f_y + 2z f_z. \end{aligned} \tag{7}$$

Tilsvarende viser man let ud fra (4), at

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} = y^2 f_{xx} + x^2 f_{yy} - 2xy f_{xy} - x f_x - y f_y. \tag{8}$$

Lidt mere træls er det at vise:

$$\begin{gathered} \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta} = \\ x^2 f_{xx}\cot^2\theta + y^2 f_{yy}\cot^2\theta + (x^2+y^2) f_{zz} \\ +2xy f_{xy}\cot^2\theta - 2xz f_{xz} - 2yz f_{yz} + (x f_x + y f_y)(\cot^2\theta - 1) - 2z f_z. \end{gathered} \tag{9}$$

Lægges nu (7), (8) og (9) sammen fås:

$$\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2} = r^2(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}), \tag{10}$$

og så kan vi alle være glade!

Nu vi er igang med det, kan vi jo lige iagttage, at resultatet i (4) også kan skrives:

$$\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}, \tag{11}$$

som vi genfinder i Griffiths [4.129].

Tilsvarende indser man, at (3) og (4) kan kombineres på denne måde:

$$-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} = yf_z - zf_y, \tag{12}$$

der kan skrives som

$$\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{13}$$

Tilsvarende finder man også:

$$\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{14}$$

De sidste to ligninger svarer til [4.127] og [4.128].