

Transformace operátoru momentu hybnosti do sférických souřadnic

Cílem tohoto dokumentu je detailně popsat odvození tvaru operátorů složek momentu hybnosti a velikosti momentu hybnosti ve sférických souřadnicích. Použijeme ve fyzice standardní volbu těchto souřadnic, totiž

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

Operátory složek momentu hybnosti $\hat{L}_i$ jsou definovány podle principu korespondence jako

$$\hat{L}_i := \varepsilon_{ijk} \hat{Q}_j \hat{P}_k.$$

Tudíž je třeba nejprve najít vyjádření operátorů $\hat{Q}_j$ a $\hat{P}_k$ ve sférických souřadnicích.

Pro operátory polohy se nejedná o nijak složitou úlohu. Jejich vyjádření získáme přímo z transformačních vztahů.

$$\begin{aligned}\hat{Q}_x \psi(r, \theta, \varphi) &= x \psi(r, \theta, \varphi) = r \sin \theta \cos \varphi \psi(r, \theta, \varphi), \\ \hat{Q}_y \psi(r, \theta, \varphi) &= y \psi(r, \theta, \varphi) = r \sin \theta \sin \varphi \psi(r, \theta, \varphi), \\ \hat{Q}_z \psi(r, \theta, \varphi) &= z \psi(r, \theta, \varphi) = r \cos \theta \psi(r, \theta, \varphi).\end{aligned}$$

Chceme-li do sférických souřadnic převést operátor hybnosti $\hat{P}_k$ definovaný jako

$$\hat{P}_k \psi(r, \theta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial x_k},$$

využijeme derivace složené funkce a derivaci podle proměnné x_k rozepíšeme pomocí derivací podle r , θ a φ . Jelikož pro libovolnou funkci f platí, že

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k},$$

dostáváme předpis pro derivaci podle x_k ve sférických souřadnicích jako

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial r}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial \varphi}.\tag{2}$$

Abychom tento výraz měli kompletní, je třeba spočítat derivace $\frac{\partial r}{\partial x_k}$, $\frac{\partial \theta}{\partial x_k}$ a $\frac{\partial \varphi}{\partial x_k}$. Tohle je možné vícero způsoby. První z nich je přímočarý výpočet z inverzní transformace souřadnic

$$\begin{aligned}r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\ \theta &= \arccos \left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right), \\ \varphi &= \arctan \left(\frac{y}{x} \right).\end{aligned}$$

Pro další, lineárně-algebraický způsob, můžeme vyjít z toho, že je snadné zderivovat vztahy (1) podle proměnných r , θ a φ . Stejným způsobem jako u (2) můžeme psát

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z}.\end{aligned}$$

Formálně tuhle soustavu můžeme chápat následujícím způsobem

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix}}_{\mathcal{J}} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Matice $\mathcal{J}$ je Jacobiho maticí transformace (1) a tudíž je regulární pro rozsah parametrů r , θ a φ . Z toho důvodu je možné ji invertovat a získat vyjádření derivací podle kartézských souřadnic v řeci souřadnic sférických jako

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \mathcal{J}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}.$$

Spočítat matice $\mathcal{J}$ a $\mathcal{J}^{-1}$ je přímočaré¹. Uvedme proto jen výsledek

$$\mathcal{J}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \theta & \frac{\cos \varphi \cos \theta}{r} & -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \sin \varphi \sin \theta & \frac{\sin \varphi \cos \theta}{r} & \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial \theta}{\partial x} & \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial \theta}{\partial y} & \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial r}{\partial z} & \frac{\partial \theta}{\partial z} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Maje k dispozici tyto koeficienty, můžeme vyjádřit operátory $\hat{P}_k$ ve sférických souřadnicích:

$$\begin{aligned} \hat{P}_x &= -i\hbar \left(\cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{P}_y &= -i\hbar \left(\sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{P}_z &= -i\hbar \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned}$$

Nyní máme k dispozici vše potřebné pro zapsání operátorů složek momentu hybnosti ve sférických souřadnicích.

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{Q}_y \hat{P}_z - \hat{Q}_z \hat{P}_y = -i\hbar \left(\textcolor{red}{r} \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right. \\ &\quad \left. - \textcolor{blue}{r} \cos \theta \left(\sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \\ &= -i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y &= \hat{Q}_z \hat{P}_x - \hat{Q}_x \hat{P}_z = -i\hbar \left(\textcolor{red}{r} \cos \theta \left(\cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - \textcolor{blue}{r} \sin \theta \cos \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \\ &= -i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= \hat{Q}_x \hat{P}_y - \hat{Q}_y \hat{P}_x = -i\hbar \left(\textcolor{red}{r} \sin \theta \cos \varphi \left(\sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - \textcolor{blue}{r} \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

¹Pro výpočet inverze se v tomto případě náramně dobře osvědčila metoda výpočtu pomocí adjungované matice

Všimněte si, že jsme operátory skládali. Výsledný operátor vždy vznikl tím, že jsme si představili, že operátor $\hat{P}_k$ zapůsobí na funkci (v zápise jsme se následně od funkce odprostili) a následně na tento výsledek působí operátor polohy, který se chová jako násobení prefaktorem.

V tuhle chvíli můžeme začít také skládat operátory $\hat{L}_i$ a získat tak operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti $\hat{L}^2$, který je definován jako

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

Nejprve vypočteme jednotlivé kvadráty a ty následně posčítáme. Opět budeme operátory skládat. Uvědomte si, na co všechno můžou působit členy s derivací.

$$\begin{aligned}\hat{L}_x^2 &= \hat{L}_x \hat{L}_x = -i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{L}_x + \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{L}_x \right) = -i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(-i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. + \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(-i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right) \\ &= -\hbar^2 \left[-\sin \varphi \cos \varphi \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} + \cotg^2 \theta \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos^2 \varphi \cotg^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cos^2 \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 2 \sin \varphi \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} \right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_y^2 &= \hat{L}_y \hat{L}_y = -i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{L}_y + \sin \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{L}_y \right) = -i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(-i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. + \sin \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(-i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\sin \varphi \cos \varphi \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} + \cotg^2 \theta \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin^2 \varphi \cotg^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \sin^2 \varphi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - 2 \sin \varphi \cos \varphi \cotg \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} \right]\end{aligned}$$

$$\hat{L}_z^2 = \hat{L}_z \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Sečtením všech tří výrazů získáme konečně výsledný operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti $\hat{L}^2$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[(\cotg^2 \theta + 1) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right].\end{aligned}$$

Z tohoto vyjádření mimo jiné vidíme, že operátor $\hat{L}^2$ působí netriviálně na funkce, kterou jsou závislé na úhlech θ a φ . Navíc, pokud si vzpomeneme na TEF, kde jsme viděli tvar Laplaceova operátoru ve sférických souřadnicích, totiž na výraz

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right),$$

zjistíme, že Hamiltonián volné částice vyjádřený ve sférických souřadnicích (což není nic jiného, než ten Laplace výše pronásobený nějakou konstantou), lze zapsat jako

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2Mr^2} \hat{L}^2.$$