文章编号:1000-5862(2017)06-0633-04

球极坐标系下角动量平方算符与拉普拉斯算符的推导
——多元复合函数微商法则在量子力学中的应用

温祖标[1],熊谢微[1],代 芳[2],曹贻利[1],李永红[1],朱 佳[1],章 磊[1]
(1.江西师范大学化学化工学院,江西 南昌 330022;2.南昌工程学院,江西省精密驱动与控制重点实验室,江西 南昌 330099)

摘要:采用引入变量的多元复合函数微商法则,将直角坐标系下的 1 阶偏微分形式变换成球极坐标形式,进而推导出球极坐标系下角动量平方算符与拉普拉斯算符的表达式.这将使得在量子力学中求解 Schrödinger 方程、各角动量算符对应的各角量子数变得更加简单.

关键词:角动量平方算符;拉普拉斯算符;球极坐标系;多元复合函数微商法则;量子力学
中图分类号:O 411.1 文献标志码:A DOI:10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2017.06.15

0 引言

20 世纪初,量子力学的诞生与发展不仅为人们认识微观世界开辟了道路,而且为物理学乃至整个自然科学的发展奠定了坚实的理论基础[1-2].薛定谔方程(Schrödinger equation)是量子力学中描述微观粒子运动状态的一个基本方程[3-5],是关于决定体系能量算符的本征值和本征函数(或本征态)的方程,对于计算不同微观体系的能量及其运动状态(即波函数)具有重要作用[6-8];该方程在化学中有着重要应用[9],常为贯穿高等教育《结构化学》核心内容的主线,其地位可媲美于经典物理学中的牛顿运动方程[10].根据量子力学的基本假设,微观粒子的Schrödinger方程[6-7]为 $[-h^2\nabla^2/(8\pi^2 m)+\hat{V}]\psi=E\psi$,其中 $\nabla^2=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$ 为拉普拉斯算符,用直角坐标形式表示;$\hat{V}$为势能算符,是两微观粒子间距离(r)的函数,常用球极坐标形式表示,如单电子原子,$\hat{V}=-Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$.

角动量是 20 世纪除动量和能量之外的又一重要力学概念[11].经典力学有轨道角动量,对应到量子力学中就有轨道角动量算符和角动量平方算符[12].角动量算符是厄米算符(Hermitian operator),存在本征值和本征矢量完全集.在研究微观体系的运动状态时,常通过求解角动量算符的本征方程,从而得出该算符的本征值和本征态,以确定它们各自的运动状态和性质[13].如通过轨道角动量算符、自旋角动量算符、总角动量算符、角动量平方算符与角动量在特定方向上的分量算符,以计算出不同的量子数,如角量子数 l、磁量子数 m、自旋量子数 s、自旋磁量子数 m_s、总量子数 j、总磁量子数 m_j[6].然而,在化学专业的经典教材《结构化学》中,角动量算符 $\hat{M}_x$、$\hat{M}_y$、$\hat{M}_z$和角动量平方算符 $\hat{M}^2$ 的球极坐标形式也仅直接给出结果[6],或者是采用矢量分析的方法来处理,即将物理量都代换成球坐标系下的算符矢量后,经矢量分析运算后仅简略地给出结果[14-15].

在求解 Schrödinger 方程时,通常把直角坐标系下的 ∇^2 转化成与 $\hat{V}$ 相同的球极坐标系下的表示式,然后采用变数分离法求解.然而,《结构化学》教材仅简要地给出球极坐标系下的 ∇^2 形式,而没有给出详细的数学求解过程[6-8].数学物理方法的一些教材虽然给出了正确的推导过程,但是引入的“正交曲线坐标系”内容,比较抽象,不易理解[16].此外,相关文献要么太扼要,要么太繁琐.如翟峰[17]虽然给出了 ∇^2 在“正交坐标系”下的一个简洁形式,并由此导出球极坐标下的 ∇^2 的表达式,但是过于扼要,难以理解;姚久民[18]给出了球极坐标系中 ∇^2 表达式的推导,但过程异常繁琐.

本文采用引入变量的多元复合函数微商法,通

收稿日期:2017-05-25
基金项目:国家自然科学基金(21463013),江西省自然科学基金(20171BAB203013),江西省教育厅科学技术研究课题(GJJ160290)和江西省高等学校教学改革研究课题资助项目.
作者简介:温祖标(1976-),男,江西石城人,副教授,博士,主要从事纳米材料电化学研究.E-mail:wenzubiao@163.com

过纯粹标量运算,清晰地推导出角动量平方算符和拉普拉斯算符由直角坐标系向球极坐标系转化的表达式.此方法直观易懂,不仅特别适合化学专业师生教学,而且使求解 Schrödinger 方程、各角动量算符对应的各量子数变得更为简单.

1　主要结果

角动量平方算符

$$\hat{M}^2 = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right],$$

与拉普拉斯算符

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

2　结果推导

2.1　一阶偏微分的推导

球极坐标与直角坐标的关系如图 1 所示.设空间一向量 $\vec{r}$,其长度为 r,与 z 轴之间的夹角为 θ,在 xOy 平面内的射影长度为 R,射影 R 与 x 轴之间的夹角为 φ,其中 $r>0$,$0\leqslant\varphi\leqslant\pi$,$0\leqslant\theta\leqslant 2\pi$,则

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \tag{1}$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi, \tag{2}$$

$$z = r\cos\theta, \tag{3}$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \tag{4}$$

$$\cos\theta = z/\sqrt{x^2+y^2+z^2}, \tag{5}$$

$$\tan\varphi = y/x. \tag{6}$$

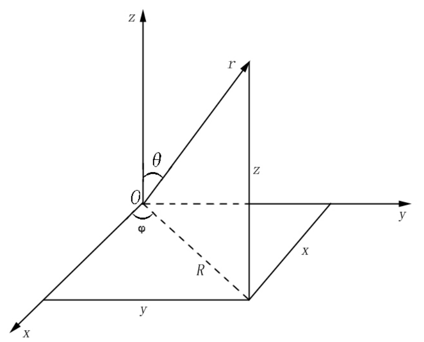

图 1　直角坐标系与球极坐标系的关系

因为 $x=f(r,\theta,\varphi)$,根据复合函数的偏微分关系,有

$$\frac{\partial}{\partial x} = \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{7}$$

将(4)式、(5)式和(6)式对 x 求 1 阶偏导数,由(1)式和(2)式得

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi, \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}, \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}, \tag{8}$$

将(8)式代入(7)式,得

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

同理,因为 $y=f(r,\theta,\varphi)$,根据复合函数的偏微分关系,则

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{9}$$

因为 $z=f(r,\theta)$,根据复合函数的偏微分关系,则

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}. \tag{10}$$

2.2　角动量平方算符的推导

已知角动量在 x 轴分量的算符为

$$\hat{M}_x = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right).$$

将(2)、(3)、(9)、(10)式代入算符 $\hat{M}_x$,化简得

$$\hat{M}_x = \left(\frac{ih}{2\pi}\right)\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{11}$$

同理,已知角动量在 y 轴分量和 z 轴分量的算符分别为

$$\hat{M}_y = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \hat{M}_z = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right),$$

化简得

$$\hat{M}_y = \left(\frac{ih}{2\pi}\right)\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{M}_z = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi} = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{12}$$

将(12)式作用在波函数上,可求磁量子数 m.

又因为 $|M^2| = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$,将(11)～(12)式代入 $|M^2|$,化简得

$$|M^2| = -\left(\frac{ih}{2\pi}\right)^2\left(\cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]. \tag{13}$$

推得的(11)～(13)式与文献[6]所示结果一致;将(13)式作用在波函数上,可求角量子数 l.

2.3　拉普拉斯算符的推导

$\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$,为更易求得 2 阶偏微分 $\partial^2/\partial x^2$、$\partial^2/\partial y^2$ 和 $\partial^2/\partial z^2$,引入中间变量 R.由图 1 得 $R^2 = x^2 + y^2$,$\tan\varphi = y/x$.分别对 x、y 求 1 阶偏微分,并将 $x = R\cos\varphi$,$y = R\sin\varphi$ 代入得

$$\partial R/\partial x = x/R = \cos\varphi, \partial\varphi/\partial x = -\sin\varphi/R;$$

$$\partial R/\partial y = y/R = \sin\varphi, \partial\varphi/\partial y = \cos\varphi/R.$$

根据复合函数求导公式和 $x = f(R,\varphi)$ 得

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial R}{\partial x}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\varphi\frac{\partial}{\partial R} - \frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{14}$$

对(14)式求 2 阶偏微分得

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x} =$$

$$\frac{\partial}{\partial R}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial R} - \frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cos\varphi + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial R} - \frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(-\frac{\sin\varphi}{R}\right) = \left\{\left[\frac{\partial(\cos\varphi)}{\partial R}\frac{\partial}{\partial R} + \cos\varphi\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial}{\partial R}\right)\right] - \left[\frac{\partial(\sin\varphi/R)}{\partial R}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\right\}\cos\varphi -$$

$$\left\{\left[\frac{\partial(\cos\varphi)}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial R} + \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial R}\right)\right] - \left[\frac{\partial(\sin\varphi/R)}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\right\}\frac{\sin\varphi}{R}$$

(因为 φ 和 R 为独立变量，$\partial\varphi/\partial R = 0$，所以 $\frac{\partial(\cos\varphi)}{\partial R}\frac{\partial}{\partial R} = -\sin\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial R}\frac{\partial}{\partial R} = 0$) $=$

$$0 + \cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{R^2}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\sin^2\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial R} - \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\sin\varphi\cos\varphi}{R^2}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin^2\varphi}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2\sin\varphi\cos\varphi}{R^2}\frac{\partial}{\partial\varphi} -$$

$$\frac{2\sin\varphi\cos\varphi}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial R\partial\varphi} + \frac{\sin^2\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\sin^2\varphi}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{15}$$

同理，由复合函数求导公式和 $y = f(R,\varphi)$ 得

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial R}{\partial y}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\cos\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{16}$$

对(16)式求 2 阶偏微分，得

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{2\sin\varphi\cos\varphi}{R^2}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{2\sin\varphi\cos\varphi}{R}\frac{\partial^2}{\partial R\partial\varphi} + \frac{\cos^2\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\cos^2\varphi}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{17}$$

由图 1 得 $r^2 = z^2 + R^2$，$\tan\theta = R/z$，分别对 z、R 求 1 阶偏微分，并将 $z = r\cos\theta$，$R = r\sin\theta$ 代入得

$$\partial r/\partial z = z/r = \cos\theta，\partial\theta/\partial z = -\sin\theta/r;$$

$$\partial r/\partial R = R/r = \sin\theta，\partial\theta/\partial R = \cos\theta/r.$$

根据复合函数求导公式和 $z = f(r,\theta)$ 得

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}.$$

这与(10)式一致. 对(10)式求 2 阶偏微分，得

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} + \frac{\sin^2\theta}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}. \tag{18}$$

同理，根据复合函数求导公式和 $R = f(r,\theta)$ 得

$$\frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial r}{\partial R}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial R}\frac{\partial}{\partial\theta} = \sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}. \tag{19}$$

对(19)式求 2 阶偏微分，得

$$\frac{\partial^2}{\partial R^2} = \sin^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} - \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}. \tag{20}$$

把(15)、(17)和(18)式代入 $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$，化简得

$$\nabla^2 = \left(\cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} + \frac{2\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin^2\theta}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) + \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}.$$

再把(19)、(20)式和 $R = r\sin\theta$ 代入，整理得

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

该表达式与文献[5]给出的结果相一致.

将上述 ∇^2 的球极坐标形式和 $\hat{V} = -Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ 代入单电子原子的 Schrödinger 中，则球极坐标系下的单电子原子 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0,$$

其中 $\psi = \psi(r,\theta,\varphi)$. 这与经典教材《结构化学》给出的结果相同[6-7]. 采用变数分离法解此偏微分方程，可求主量子数 n. 结合相应的角动量平方算符 $\hat{M}^2$，可求角量子数 l 和磁量子数 m.

3　结论

本文通过建立直角坐标-球极坐标系，引入中间变量，在概念清晰、计算量适中的情况下推导出球极坐标系下的 1 阶、2 阶偏微分表达式，进而求得球极坐标系下角动量平方算符与拉普拉斯算符的数学表达式. 这不仅拓展了高等学校《结构化学》的内容，降低了学生的学习难度，增加了他们的学习兴趣，而且为原子轨道(波函数)的量子数(n、l 和 m)、原子轨道的节面、轨道空间分布及其极大值、与原子轨道轮廓图(如锥体角)等知识的学习奠定了基础; 并且有助于师生后续对分子轨道、原子杂化轨道、休克尔

分子轨道、羰基配位化合物中 σ-π 配键的形成以及前线轨道理论、分子轨道对称守恒原理等内容的学习和讲授.

4 参考文献

[1] 王义遒.迟到的巨著《量子力学》(一、二卷)中文版面世[J].物理,2017,46(3):201-202.

[2] 胡胜,朱祖良,罗顺忠,等.金属 Pt 表面水蒸汽分子吸附的量子力学计算[J].化学学报,2007,65(2):100-106.

[3] 毛安民,李安然.薛定谔方程及薛定谔-麦克斯韦方程的多解[J].数学学报,2012,55(3):425-436.

[4] 徐远,孔令华,王兰,等.带有阻尼项的 4 阶非线性薛定谔方程的显式辛格式[J].江西师范大学学报:自然科学版,2013,37(3):244-248.

[5] 崔少燕,吕欣欣,辛杰.广义非线性薛定谔方程描述的波坍缩及其演变[J].物理学报,2016,65(4):1-7.

[6] 周公度,段连运.结构化学基础[M].4 版.北京:北京大学出版社,2008:12.

[7] 夏少武,夏树伟.结构化学[M].北京:科学出版社,2012.

[8] 张洪涛,熊红梅,凃玲英.一种改进的量子退火算法[J].江西师范大学学报:自然科学版,2016,40(5):473-475.

[9] 苑壮东,考秀娟.薛定谔方程在化学中的应用[J].济宁学院学报,2008,29(6):42-43.

[10] 梁辉.从薛定谔方程谈量子力学与经典物理的区别[J].安徽技术师范学院学报,2003,17(1):70-71.

[11] 王志刚,张立换,徐建军.角动量理论在现代技术中的应用[J].现代物理知识,2007(1):10-13.

[12] 周希坚,边志华,杨学军.对量子力学中角动量的一点认识[J].大学物理,2000,19(11):16-19.

[13] 何崇荣.角动量算符的本征值方程求解[J].高等函授学报:自然科学版,2010,23(6):39-41.

[14] 岑天庆.一种角动量算符的简便推导方法[J].大学物理,2010,29(11):26-28.

[15] 周运清,黄文涛,周恺元.角动量平方算符的矢量分析计算[J].物理与工程,2016,26(6):48-50.

[16] 梁昆淼.数学物理方法[M].2 版.北京:高等教育出版社,1994:511.

[17] 翟峰.拉普拉斯算符在正交坐标系的表达式[J].大学物理,2015,34(7):11-12.

[18] 姚久民,石凤良.球坐标系中拉普拉斯算符表达式的推导[J].唐山师范学院学报,2005,27(5):67-71.

The Derivation to Angular Momentum Square Operator and Laplace Operator in Spherical Polar Coordinates

——A Case Application on Derivative Principle of Multiple Function in Quantum Mechanics

WEN Zubiao[1],XIONG Xiewei[1],DAI Fang[2],CAO Yili[1],LI Yonghong[1],ZHU Jia[1],ZHANG Lei[1]

(1. College of Chemistry and Chemical Engineer,Jiangxi Normal University,Nanchang Jiangxi 330022,China;
2. Jiangxi Province Key Laboratory of Precision Drive and Control,Nanchang Institute of Technology,Nanchang Jiangxi 330099,China)

Abstract: Several universal formulas of first-order partial differential forms in rectangular coordinate system are correspondingly transformed into forms of spherical polar coordinate by using derivative principle of multiple function leading variable. Subsequently,the formulas of the angular momentum square operator and Laplace operator in spherical polar coordinate are further deduced on the basis of the obtained forms. It is to be easier for the solution of Schrödinger equation and the correspondent different quantum number of the different angular momentum operator in quantum mechanics.

Key words: angular momentum square operator; Laplace operator; spherical polar coordinate; derivative principle of multiple function; quantum mechanics

(责任编辑:曾剑锋)