軌道角運動量演算子

　ここでは軌道角運動量演算子の球座標表示を求める。まず、

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

で、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r} &= x \cdot \boldsymbol{i} + y \cdot \boldsymbol{j} + z \cdot \boldsymbol{k} \\ \boldsymbol{p} &= p_x \cdot \boldsymbol{i} + p_y \cdot \boldsymbol{j} + p_z \cdot \boldsymbol{k} \end{aligned}$$

だから、

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{r}} &= \hat{x} \cdot \boldsymbol{i} + \hat{y} \cdot \boldsymbol{j} + \hat{z} \cdot \boldsymbol{k} \\ &= x \cdot \boldsymbol{i} + y \cdot \boldsymbol{j} + z \cdot \boldsymbol{k} \\ &= \boldsymbol{r} \\ \hat{\boldsymbol{p}} &= \hat{p_x} \cdot \boldsymbol{i} + \hat{p_y} \cdot \boldsymbol{j} + \hat{p_z} \cdot \boldsymbol{k} \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \cdot \boldsymbol{i} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \cdot \boldsymbol{j} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \cdot \boldsymbol{k} \\ &= \frac{\hbar}{i}\nabla \end{aligned}$$

と量子化することにより、

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}} &= \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \\ &= \boldsymbol{r} \times \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \end{aligned}$$

として、

$$\begin{aligned} \hat{L_x} &= \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ \hat{L_y} &= \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ \hat{L_y} &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}$$

が得られるので、$\dfrac{\partial}{\partial x}, \dfrac{\partial}{\partial y}, \dfrac{\partial}{\partial z}$ をそれぞれ、球座標変換して、r, θ, φ で表しても良いが、ここでは球座標基底を用いて求めてみよう。

　まず、球座標基底を用いると、$\boldsymbol{r}$ は、

$$\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{e}_r$$

と表される。

また、

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r}\cdot \boldsymbol{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\cdot \boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\cdot \boldsymbol{e}_\varphi$$

だから、

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}} &= r\boldsymbol{e}_r \times \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \\
&= \frac{r\hbar}{i}\boldsymbol{e}_r \times \left(\frac{\partial}{\partial r}\cdot \boldsymbol{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\cdot \boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\cdot \boldsymbol{e}_\varphi\right) \\
&= \frac{r\hbar}{i}\left(-\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\boldsymbol{e}_{\varphi *}\right) \\
&= \frac{i\hbar}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\boldsymbol{e}_\theta - i\hbar\frac{\partial}{\partial \theta}\boldsymbol{e}_\varphi
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_r &= \sin\theta \boldsymbol{h}_\varphi + \cos\theta \boldsymbol{k} \\
&= \sin\theta\cos\varphi \boldsymbol{i} + \sin\theta\sin\varphi \boldsymbol{j} + \cos\theta \boldsymbol{k} \\
\boldsymbol{e}_\theta &= \cos\theta \boldsymbol{h}_\varphi - \sin\theta \boldsymbol{k} \\
&= \cos\theta\cos\varphi \boldsymbol{i} + \cos\theta\sin\varphi \boldsymbol{j} - \sin\theta \boldsymbol{k} \\
\boldsymbol{e}_\varphi &= -\sin\varphi \boldsymbol{i} + \cos\varphi \boldsymbol{j}
\end{aligned}$$

だから、

$$\begin{aligned}
\hat{L_x} &= i\hbar\left(\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta}\right) \\
\hat{L_y} &= i\hbar\left(\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta}\right) \\
\hat{L_z} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}$$

が得られた。