報　文

(國立서울大學校 文理科大學 化學科) (4282年10月30日受理)

量子力學에있어서의 Operator의 直交曲線座標에의變換에關하여

金　舜　敏

序　論

物理學에있어서 問題의對稱性에따라 適當한 座標系를 導入하여야함은 새삼스러히 말할必要도없다 그런故로 量子力學에있어서 物理量을代表하는 Operator를 다른 座標系에 變換하는問題가 생진다. 이때 重要한것은 直交曲線座標에의變換이고, 이 以外의變換은 事實上 不必要한것이다. 그런데 이問題에關하여 至今까지알려진 第一正統的인方法은 一般座標系에의變換을 解決한다음 그特殊한境遇로서 이를 解決하는方法이다. (See, R. Courant und D. Hilbert; Methoden der Mathematischen Physik BdI, S. 194, 1931) 이方法은 數式의對稱性이 高度로 保有되어있기는하나 좀高等한手法을 必要케한다. 그리하여 當初부터 直交曲線座標에局限하여 이問題를取扱하는 簡便한方法으로서 Vector에關한 Gauss의 定理等을 使用하는것이 提出되었으나(See, Abraham-Becker; Theorie der Elektrisitaet BdI, S. 20 1933) 이것은 數學的嚴密性이 不足한것이다.

筆者는 이論文에서 當初부터 直交曲線座標에局限하되 數式의對稱性 및 嚴密性을 保有하여 또 前二者보다 極度로簡明하고 初等的인方法으로 이問題를 解決하였다.

數學的豫備定理

三次元空間에서 Cartesian座標 (x_1, x_2, x_3)와 曲線座標 (u_1, u_2, u_3)間에 一對一의 二次微分可能한 函數關係가 存在할때 (u_1, u_2, u_3)座標系가 直交曲線座標系일條件은

$$\frac{1}{h_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}=h_j\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\quad (i, j=1,2,3) \tag{1}$$

이다. 但 h_j는

$$h_j=\sqrt{\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\right)^2} \tag{2}$$

(1)式의關係를 以後 直交의 逆轉則이라고 부르기로하자.

〔證明〕

普通잘알려진 直交條件은

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_k}=0\quad (j\neq k) \tag{3}$$

只今

$A_{ij}=\frac{1}{h_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}$로 놓으면 (3)式은

$j=k$일때를 許容하여 다음과같이된다.

$$\sum_i A_{ij}A_{ik}=\delta_{jk}\ (\delta_{jk}: \text{Kronecker's delta}) \tag{4}$$

그런데

$$dx_i=\sum_j\frac{\partial x_i}{\partial u_j}du_j$$

$$=\sum_j A_{ij}h_j du_j \tag{5}$$

(4)式을利用하면 (5)式에서

$$h_j du_j=\sum_i A_{ij}dx_i$$

$$\therefore h_j\frac{\partial u_j}{\partial x_i}=A_{ij}$$

$$\therefore h_j\frac{\partial u_j}{\partial x_i}=\frac{1}{h_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}$$

卽 (1)式이 成立된다.

다음에 逆으로 (1)式이成立하면

$$\sum_i A_{ij}A_{ik}=\sum_i\frac{1}{h_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{1}{h_k}\frac{\partial x_i}{\partial u_k}$$

$$=\sum_i\frac{h_j}{h_k}\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial u_k}$$

$$=\delta_{jk}$$

卽 (4)式이成立된다. 따라서 (1)式은 (u_1, u_2, u_3) 座標가 直交曲線座標일條件이다. (證了)

이逆轉則을 利用하면 $\frac{\partial x_i}{\partial u_j}$ 를알고 $\frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ 를求할수있다

한가지例로서 極座標 (r, θ, ϕ) 에있어서
$h_r=1,\ h_\theta=1,\ h_\phi=r\sin\theta$

따라서 逆轉則은

$$\frac{\partial r}{\partial x_i}=\frac{\partial x_i}{\partial r},\quad r\frac{\partial \theta}{\partial x_i}=\frac{1}{r}\frac{\partial x_i}{\partial \theta},$$

$$r\sin\theta\frac{\partial \phi}{\partial x_i}=\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial x_i}{\partial \phi}$$

여기서 $\frac{\partial x_i}{\partial r}$, $\frac{\partial x_i}{\partial \theta}$, $\frac{\partial x_i}{\partial \phi}$ 를求하면 $\frac{\partial r}{\partial x_i}$, $\frac{\partial \theta}{\partial x_i}$, $\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ 를 알수있다.

逆轉則이 이러한性質을 가진故로 變數變換에 應用되는것이다.

Operator 의變換

(1) 運動量의成分의變換

이것은 第一基本的인問題이다. 運動量의 x_i 成分의 Operator P_{x_i} 는 $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x_i}$ 이다. (여기 h 는 Planck's constant) 그런데

$$\frac{\partial}{\partial x_i}=\sum_j\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial u_j}$$

逆轉則을代入하면

$$\frac{\partial}{\partial x_i}=\sum\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{\partial}{\partial u_j}\qquad(6)$$

따라서

$$P_{x_i}=\frac{h}{2\pi i}\sum_j\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{\partial}{\partial u_j}\qquad(7)$$

(2) 運動量의自乘의 Operator의變換

運動量의自乘의 Operator P^2 는

$$P^2=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\sum_i\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

따라서 Laplacian $\Delta=\sum_i\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ 를 變換하면된다

(6)式을代入하면

$$\Delta=\sum_i\sum_j\sum_k\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{\partial x_i}{\partial u_k}\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right)$$

$$=\sum_i\sum_j\sum_k\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial^2 x_i}{\partial u_j\partial u_k}\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}+\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right)$$

그런데

$$\sum_i\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{\partial^2 x_i}{\partial u_j\partial u_k}=\frac{1}{2}\frac{\partial h_j^2}{\partial u_k}$$

$$\sum_i\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial x_i}{\partial u_j}\frac{\partial x_i}{\partial u_k}=\delta_{jk}$$

$$\therefore\Delta=\sum_j\sum_k\left[\frac{1}{h_j}\frac{\partial h_j}{\partial u_k}\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}+\delta_{jk}\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right)\right]$$

$$=\sum_k\left[\frac{1}{h_1h_2h_3}\left\{\frac{\partial}{\partial u_k}(h_1h_2h_3)\right\}\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}+\frac{\partial}{\partial u_k}\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right]$$

$$=\sum_k\frac{1}{h_1h_2h_3}\frac{\partial}{\partial u_k}\left(\frac{1}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right)\qquad(8)$$

$$\therefore P^2=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\sum_k\frac{1}{h_1h_2h_3}\frac{\partial}{\partial u_k}\left(\frac{h_1h_2h_3}{h_k^2}\frac{\partial}{\partial u_k}\right)\qquad(9)$$

(3) Hamiltonian 의變換

Hamiltonian H, Potential 을 V라할때, H 는 大體로

$$H=\frac{P^2}{2m}+V(x_1\,x_2\,x_3)$$

임으로 P^2의變換으로 大槪는 解決된다.

(4) 角運動量의成分의 Operator의變換

角運動量의成分의 Operator M_x 는

$$M_x=\frac{h}{2\pi i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

(6)式을代入하면

$$M_x=\frac{h}{2\pi i}\sum_j\left(y\frac{\partial z}{\partial u_j}-z\frac{\partial y}{\partial u_j}\right)\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}$$

$$=\frac{h}{2\pi i}\sum_j y^2\left\{\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{z}{y}\right)\right\}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}\qquad(10)$$

同樣으로

$$M_y=\frac{h}{2\pi i}\sum_j z^2\left\{\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{x}{z}\right)\right\}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}\qquad(11)$$

$$M_z=\frac{h}{2\pi i}\sum_j x^2\left\{\frac{\partial}{\partial u_j}\left(\frac{y}{x}\right)\right\}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}\qquad(12)$$

(5) 角運動量의自乘의 Operator의變換

角運動量의自乘의 Operator M^2 는

$$M^2=M_x^2+M_y^2+M_z^2$$

$$=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2+\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2+\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right]$$

$$=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 r^2\left[\Delta-\left\{\frac{1}{r}\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}+1\right)\right\}^2\right]$$

여기

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

Δ : Laplacian (8)式參照

그런데 (6)式을利用함으로서

$$x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}=\sum_j r\frac{\partial r}{\partial u_j}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}$$

따라서

$$M^2=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 r^2\left[\Delta-\left(\sum_j\frac{\partial r}{\partial u_j}\frac{1}{h_j^2}\frac{\partial}{\partial u_j}+\frac{1}{r}\right)^2\right]\qquad(13)$$

以上으로 量子力學에서重要한 Operator 를 直交曲線座標에 變換하였다。 이手法은 量子力學에 利用될뿐만아니라 Cartesian座標에서 直交曲線座標에의 微分變數의變換에는 恒常利用할수있고 또 그手法의 初等的이고도 簡明한點에 特히 初學者의參考가될줄 믿는다。

끝으로 이論文을쓰는데있어서 모든點을 師範大學에 계신 親友 黃得炫先生과 討議하였으며 여기 謝意를 表明하는바이다。