12.10/2013　学修相談実施報告

来室学生

　三回生　　男子　二名

　計二名

質問内容

　ハミルトニアン（二次元）の極座標表示を求めるところで、結果を記憶するだけではなく、途中の計算過程も自分でできるようにしたいので教えてほしい。 特に、教科書の問題 5-30 の式をよく理解したい。

回答内容

1．力学で用いる運動量が量子力学では「演算子」で表されること。 位置エネルギーを表す位置座標は量子力学でも力学同様そのまま変数として用いればよいこと、などを簡単に説明し、量子力学でもちいる「演算子」は教科書の表4．1にまとめられているのでそれを参考にすればよい、特に運動量の演算子を必ず覚えること、たとえば力学の運動量 $p_x = m\upsilon_x$ は量子力学では演算子として

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

と表され、運動エネルギーの演算子は、量子力学では下式右辺のように表されることがわかる。

$$\frac{1}{2m}(p_x)^2(\text{力学}) \;\Rightarrow\; = \left(\frac{1}{2m}\right)\times\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\text{量子力学})$$

　全エネルギーは運動エネルギーと位置エネルギーの和で表されるので、全エネルギー（ハミルトニアン）の演算子 $\hat{H}$ は以下のように表されることは容易に理解できる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)$$

2．$\hat{H}$ の極座標表示を求める方法は何通りかあるが、教科書の問題 5-30 記載された式を順番に説明し、学生が自分で誘導、ないしは式の意味を理解できるように努めた。 ポイントはハミルトニアンが微分演算子を含み、演算子は演算子の右側にあるものすべてについて作用する（たとえば関数の積の微分のように）ことが理解できているかどうかである。

3．　問題 5－30 の式の誘導を順番に説明した。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_\vartheta\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y \qquad (2)$$

　式(2)の関係があることは微分の変数変換に慣れているとなんでもないが、以下のように考えると、より理解しやすいのではないか、と説明。

$f(x,y)=f(r,\vartheta)$の両辺の全微分はそれぞれ

$$df(x,y)=\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy \qquad (i)$$

$$df(r,\vartheta)=\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_\vartheta dr+\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r d\vartheta \qquad (ii)$$

式(i), (ii)を等しいとおいて式(iii)が得られ、

$$\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy=\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_\vartheta dr+\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r d\vartheta \qquad (iii)}$$

この式において$dy=0$として両辺をdxで除すと下式、つまり式(2)が得られる。最後の式はrが一定のときのものである。

$$\boxed{\begin{aligned}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y &=\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_\vartheta\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_y+\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y \qquad (2)\\ &=\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_\vartheta+\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r\\ &=\left\{\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)_\vartheta+\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)_r\right\}f\\ \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_y &=\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)_\vartheta+\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)_r \quad \overset{r=const.}{\Rightarrow} \quad \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_y=\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)_r\end{aligned}}$$

このような方法は熱力学変数の変数変換によく用いた方法で、何を定数とした偏微分かがよく理解できる、と説明。

4．式(4)の誘導

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y=-\frac{\sin\vartheta}{r}\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r \qquad (4)$$

式(2)においてrを定数とすると、第一項がゼロになり、式(2')が得られるので

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y=\left(\frac{\partial f}{\partial \vartheta}\right)_r\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y \qquad (2')$$

$\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y$を求めればよいことになる。$\vartheta$は$x, y$の関数として式(1)のように表されるので、

$$\vartheta=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \qquad (1)$$

$\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y$はよく知られた逆関数の微分で、(学生は逆関数の微分は知っていると答えた)

$\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y=-\frac{\sin\vartheta}{r}$が得られる。これを式（2'）に代入すれば、式(4)が得られる。

５．　最終式二次元の運動エネルギー演算子の極座標表現の誘導－r 一定の場合

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=\left(\frac{\partial}{\partial x}\times\frac{\partial}{\partial x}\right)f$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=-\frac{\sin\vartheta}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\times\frac{\partial}{\partial x}=-\frac{\sin\vartheta}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r\times-\frac{\sin\vartheta}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$$

$$=\frac{\sin^2\vartheta}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}\right)_r+\frac{\sin\vartheta\cos\vartheta}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$$

演算子$\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$は微分演算子で、右側の関数$\frac{\sin\vartheta}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$への演算は関数$\frac{\sin\vartheta}{r}$と$\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)_r$の積になっていることに注して計算すれば上の式は容易に導ける、と説明。

自分で計算してみて完全な誘導ができなければまた来るようにいった。

(以上)

なお、学生には説明しなかったが、上記4で説明した方法より簡便なやり方は以下の通りで、

極座標表示の全微分を連立させ、

$$x=r\cos\vartheta \quad\Rightarrow\quad dx=-r\sin\vartheta d\vartheta+\cos\vartheta dr$$

$$y=r\sin\vartheta \quad\Rightarrow\quad dy=r\cos\vartheta d\vartheta+\sin\vartheta dr$$

dr 、 $d\vartheta$について下式のように解くと、

$$dr=\cos\vartheta dx+\sin\vartheta dy$$

$$d\vartheta=-\frac{\sin\vartheta}{r}dx+\frac{\cos\vartheta}{r}dy$$

これより直ちに下式の関係が得られる。

$$\left(\frac{\partial\vartheta}{\partial x}\right)_y=-\frac{\sin\vartheta}{r},\qquad\left(\frac{\partial\vartheta}{\partial y}\right)_x=\frac{\cos\vartheta}{r}$$

この方法は三次元の極座標表示を求める場合にも用いることができる上、よくできる学生にも、微分が不得意な学生にも、微分演算子の変数変換で何を行っているか見通しもよいので、今後ラプラシアンの極座標表示の質問では、学生に問題 5-30 の演算を説明した上で、赤枠で囲んだ演算子の方法を説明することにしたい。