完全直交規格関数系とは何か

- ベクトルの内積と2つの表現
- 内積の定義の拡張
- 関数の内積の定義、直交性、規格性
- 直交規格関数系
- 完全直交規格関数系

made by R. Okamoto (Kyushu Institute of Technology)

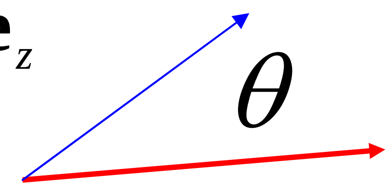
Filename=complete-function-set080422.ppt

ベクトルの内積ー2つの表現ー

ベクトルと成分、基本ベクトルを用いたその表現

$$\mathbf{A} \equiv \vec{A} \equiv (A_x, A_y, A_z) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{B} \equiv \vec{B} \equiv (B_x, B_y, B_z) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z$$



内積（スカラー積）

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \equiv AB\cos\theta \quad (\theta : \mathbf{A}\text{と}\mathbf{B}\text{のなす角度})$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_x = 1 \cdot 1 \cdot \cos 0 = 1, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_z = 1$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_y = 1 \cdot 1 \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_y = 1$$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle \equiv A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$$

ベクトルの成分が複素数であるように、2つのベクトルの内積の定義を拡張すると

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle \equiv A_x^* B_x + A_y^* B_y + A_z^* B_z,$$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = A_x B_x^* + A_y B_y^* + A_z B_z^* = B_x^* A_x + B_y^* A_y + B_z^* A_z$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = \langle \mathbf{B} | \mathbf{A} \rangle$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle = |A_x|^2 + |A_y|^2 + |A_z|^2$$

関数の内積、直交性、規格性とは何か

積分領域(x=a→x=b)で定義される2つの関数の次の積分を関数の内積と定義する。

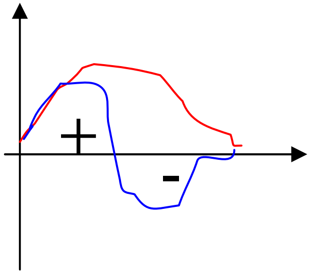
$$\text{関数}\,\psi(x),\phi(x)\text{の内積：}\int_a^b \psi^*(x)\phi(x)dx$$

上付き添え字（星印）:複素共役（complex conjugate）

関数の規格性（正規性）

$$\int_a^b \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \quad \int_a^b \phi^*(x)\phi(x)dx = 1$$

関数の直交性 $\int_a^b \psi^*(x)\phi(x)dx = 0$



直交規格関数系

$$\phi_1(x), \phi_2(x), \cdots, \phi_n(x) \equiv \{\phi_k(x); k = 1, 2, \cdots, n\}$$

$$\int_a^b \phi_k^*(x)\phi_{k'}(x)dx = \delta_{kk'}$$

Kroneckerのδ記号： $\delta_{kk'} \equiv \begin{cases} 1\ (k = k') \\ 0\ (k \neq k') \end{cases}$

完全直交規格関数系による任意の関数の展開

$$\psi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \cdots \equiv \sum_{k=1}^{n} c_k\phi_k(x)$$

展開係数の求め方

$$\int \phi_1^*(x)\psi(x)dx = \int \phi_1^*(x)c_1\phi_1(x)dx = c_1\int \phi_1^*(x)\phi_1(x)dx = c_1$$

$$\rightarrow c_k = \int \phi_k^*(x)\psi(x)dx$$

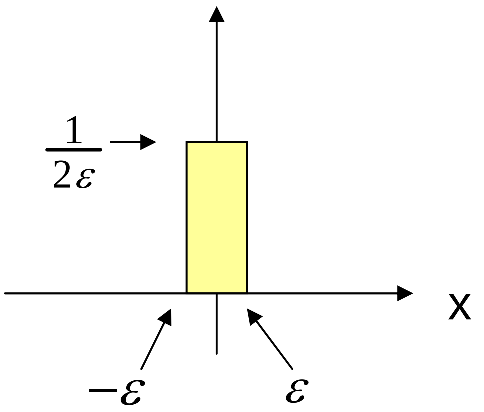
しかし、これで万万歳か？係数cを展開式に代入すれば、もとの関数と等しいはず

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{n}\left[\int \phi_k^*(x')\psi(x')dx'\right]\phi_k(x) = \int\left[\sum_{k=1}^{n}\phi_k^*(x')\phi_k(x)\right]\psi(x')dx'$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{k=1}^{n}\phi_k^*(x')\phi_k(x) = \delta(x-x')}$$

完全性（完備性）

デルタ関数の定義と性質



モデル関数による表現

$$\delta(x) \equiv \lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x), \quad \delta_\varepsilon(x) \equiv \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & (-\varepsilon \le x \le \varepsilon) \\ 0 & (|x| > \varepsilon) \end{cases}$$

ヘビーサイドの階段関数 θ (x)の広い意味の微分

$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx} \longleftarrow \theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & (x \ge 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

デルタ関数 δ (x)とは、点x＝0に面積1が集中した関数である。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx = 1, \quad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)dx = 1\,(\varepsilon:\text{任意正数})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0), \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$$

デルタ関数の有用な表現

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{ikx}dk \qquad \delta(x) = \lim_{a\to\infty}\frac{\sin(ax)}{\pi x}$$

完全直交規格関数系の実例

（１）フーリエ級数展開

（２）区間x=0→x=aの間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の波動関数（固有状態）

$$\left\{ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right); n = 1, 2, \cdots \right\}$$

規格直交性

$$\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n'\pi x}{a}\right) dx = \delta_{nn'}$$

完全性

$$\sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right) = \delta(x - x')$$

$$\mathrm{sum} \equiv \sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right)$$ の数値計算例

nmax= 100000000, a=1.0の場合

x=	1.0000000000	x’=	0.9000000000	→ sum=	3.65235
x=	1.0000000000	x’=	0.9900000000	→ sum=	-33.57476
x=	1.0000000000	x’=	0.9990000000	→ sum=	-360.48495
x=	1.0000000000	x’=	0.9999000000	→ sum=	416.26826
x=	1.0000000000	x’=	0.9999900000	→ sum=	-31868.66346
x=	1.0000000000	x’=	0.9999990000	→ sum=	-50201.51458
x=	1.0000000000	x’=	0.9999999000	→ sum=	-50406.16195
x=	1.0000000000	x’=	0.9999999900	→ sum=	50407.33862
x=	1.0000000000	x’=	0.9999999990	→ sum=	98365120.67781
x=	1.0000000000	x’=	0.9999999999	→ sum=	99983882.32352