2.4 完全規格直交系

- 波動関数　$u_n(x)$　$(n=1,2,\cdots,N)$

の性質

1. 直交性　：　$\langle u_n | u_m \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\, u_m(x)\, dx$

$= \delta_{nm}$　をみたすこと

2. 完全性　：　$\sum_{n=1}^{N} u_n(x)\, u_n^*(x') = \delta(x-x')$

をみたすこと。

この２つをみたす関数系を
「完全規格直交系」という

ここで　$\delta(x)$　を　δ-関数とよぶ

(i)　$\delta(x) = \begin{cases} \infty & x=0 \\ 0 & x\neq 0 \end{cases}$

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

● 直交関数系 $\{u_n(x)\}$ の利用

$$\{u_1(x),\ u_2(x),\ \cdots,\ u_N(x)\}$$

任意の関数 $\psi(x)$ を これ $\{u_n(x)\}$ で
展開する.

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{n=1}^{n_0} c_n u_n(x)}$$

このとき直交性 $\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$ より

$$\langle u_m | \psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x)\,\psi(x)\,dx = \sum_{n=1}^{n_0} c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x)\,u_n(x)\,dx}_{\delta_{mn}}$$

$$= c_m$$

よって

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{n_0} \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x')\,\psi(x')\,dx'\ u_n(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{n_0} u_n^*(x')\,u_n(x)\ \psi(x')\,dx'$$

もし $n_0 = N$ にて $\sum_{n=1}^{N} u_n^*(x')\,u_n(x) = \delta(x'-x)$ ならば

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\,\delta(x'-x)\,dx' = \psi(x)$$

で もとに戻る.

(注) δ-関数の起源:　　　44

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

この時　$\nabla^2 \frac{1}{r} = 0$ が示される。

(証)　$$\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{r} = \left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\right)\frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{x}{r^3}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{r} = -\frac{1}{r^3} + \frac{3x^2}{r^5}$$

よって　$$\nabla^2\frac{1}{r} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\frac{1}{r}$$

$$= -\frac{3}{r^3} + \frac{3(x^2+y^2+z^2)}{r^5} = 0$$ //

ところが　$$\int \nabla^2 \frac{1}{r}\, d^3r = \int \nabla \left(\nabla \frac{1}{r}\right) d^3r$$

$\left(\begin{array}{c} |\mathbf{r}| \leq a \\ \text{の球で積分} \end{array}\right)$　$$= \int \left(\nabla \frac{1}{r}\right)_n dS$$　(Gauss の定理)

$$= -\int_{(r=a)} \frac{1}{r^2} r^2 d\Omega = -4\pi$$ //

$\frac{1}{r}$ は $r=0$ (原点) で特異点。

よって　$$\boxed{\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\, \delta(\mathbf{r})}$$　と書くことができる

$$\delta(\mathbf{r}) \equiv \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$$