2-4 完全規格直交系

波動関数の性質（数学）

$u_n(x) \quad (n=1,2,\cdots N)$

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

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

この2つをみたす関数系を

完全規格直交系 という

$\delta(x)$: δ-関数という

［その性質］

(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 $\{u_n(x)\}$ で展開

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

この時 直交性 より $\left[\ \langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}\ \right]$

$$\langle u_m | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

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

よって

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

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

この時 $n_0 = N$ なら $\sum_{n=1}^{N} u_n^*(x')\, u_n(x) = \delta(x - x')$ より

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

[δ-関数の起源]

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

この時： $\boxed{\nabla^2 \frac{1}{r} = 0}$ 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 $$\nabla^2 \frac{1}{r} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\frac{1}{r}$$

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

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

$\left(\begin{array}{l} |r| < a \\ a\text{までの積分} \end{array}\right)$ $$= \int \left(\nabla \frac{1}{r}\right)_n dS_n \quad (\text{Gauss 定理})$$

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

$\frac{1}{r}$ は $r=0$ で特異点

よって $\boxed{\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\,\delta(\mathbf{r})}$ と書くと便利である.

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