量子力学 I　平成 26 年 4 月 14 日　　　　　　　　　工学主専攻　学籍番号　　　　　　　　　氏名

復習①ベクトル空間：（1）3 次元実ベクトル空間で、$\vec{s}$、$\vec{t}$、$\vec{u}$ は互いに直交するベクトルである。p,q,r を任意実定数として $\vec{s}$、$\vec{t}$、$\vec{u}$ の一次結合で定められる $\vec{a}=p\vec{s}+q\vec{t}+r\vec{u}$ に対して、$p=\dfrac{\vec{a}\cdot\vec{s}}{|\vec{s}|^2}$ となることを示せ。

$\vec{s}$、$\vec{t}$、$\vec{u}$ は互いに直交する（すなわち基底となっている）ことに注意して、$\vec{a}$ と $\vec{s}$ の内積を実際に計算してみると、$\vec{a}\cdot\vec{s}=p\vec{s}\cdot\vec{s}+q\vec{t}\cdot\vec{s}+r\vec{u}\cdot\vec{s}=p|\vec{s}|^2$。$\therefore p=\dfrac{\vec{a}\cdot\vec{s}}{|\vec{s}|^2}$。この式は $\vec{s}$ に対する係数 p が $\vec{a}$ と $\vec{s}$ の内積（$\vec{a}$ の $\vec{s}$ への正射影分）を $\vec{s}$ の大きさの二乗で割ったもので表わされることを示している。もし、$\vec{s}$ の大きさが 1、すなわち規格化（正規化）されている場合には、係数は $\vec{s}$ との内積（正射影）を計算するだけとなる。ベクトル空間の取り扱いには正規直交基底を用いるのが色々と都合がよい。

(2) $\vec{s}=(1,1,0)$、$\vec{t}=(1,-1,2)$、$\vec{u}=(-1,1,1)$ のとき、$\vec{a}=(5,2,-3)$ を $\vec{s}$、$\vec{t}$、$\vec{u}$ の一次結合で表わせ。

$p=\dfrac{\vec{a}\cdot\vec{s}}{|\vec{s}|^2}=\dfrac{7}{2}$、同様にして $q=\dfrac{\vec{a}\cdot\vec{t}}{|\vec{t}|^2}=-\dfrac{1}{2}$、$r=\dfrac{\vec{a}\cdot\vec{u}}{|\vec{u}|^2}=-2$ ゆえ、$\vec{a}=\dfrac{7}{2}\vec{s}-\dfrac{1}{2}\vec{t}-2\vec{u}$。

復習②関数とベクトル、内積：　区間 $[a,b]$ において定義された積分可能な関数 $f(x)$、$g(x)$ を考える。区間内の変化の様子を近似的に表わすものとして、区間 $[a,b]$ を n 等分割するときの点列 $x=a,a+\Delta,a+2\Delta,\ldots,a+(n-1)\Delta$（但し $\Delta=(b-a)/n$）に対応する関数値を列記した表式 $(f(a),f(a+\Delta),f(a+2\Delta),\ldots,f(a+(n-1)\Delta))$ 及び $(g(a),g(a+\Delta),g(a+2\Delta),\ldots,g(a+(n-1)\Delta))$ を考える。

(1)　$n\to\infty$ で $\sum_{i=0}^{n-1}\left(f(a+i\Delta)\cdot g(a+i\Delta)\right)\Delta$ は何に収束するか答えよ。（注：$(f(a),f(a+\Delta),f(a+2\Delta),\ldots,f(a+(n-1)\Delta))$ は n 次元数ベクトルの表記と形式的に同じである。この見方を発展させると、関数は一種の（無限次元）ベクトルとみなせる。題意にあるような Δ で重み付けした和が収束するならば、それを区間 $[a,b]$ における $f(x)$ と $g(x)$ の内積として定義することが適当と考えられる。）

$\sum_{i=0}^{n-1}\left(f(a+i\Delta)\cdot g(a+i\Delta)\right)\Delta$ は区間 $[a,b]$ における $f(x)\ g(x)$ のリーマン和の形であるから、$n\to\infty$、すなわち $\Delta\to 0$ としたものは区間 $[a,b]$ において $f(x)$ と $g(x)$ の積を積分したもの（リーマン積分）$\int_a^b f(x)g(x)dx$ に収束する。

$(f(a),f(a+\Delta),f(a+2\Delta),\ldots,f(a+(n-1)\Delta))$ や $(g(a),g(a+\Delta),g(a+2\Delta),\ldots,g(a+(n-1)\Delta))$ は n 次元数ベクトルの表記と同じであり、このように表わした関数の近似形に対する区間 $[a,b]$ における内積として、同順の値を掛けて足し合わせたものが適当と考えられる。ここで、各点における $f(x)$ と $g(x)$ の積の値は全区間に対して $\Delta=(b-a)/n$ の割合で寄与していると見なされるので、Δ を重みとして掛けている。（重みとして Δ を掛けないと発散してしまう！）

(2)多項式 $P_1(x)=x$ と $P_2(x)=\dfrac{1}{2}\left(3x^2-1\right)$ に対して、区間 $[-1,1]$ における内積を求めよ。

$[-1,1]$ における $P_1(x)$ と $P_2(x)$ の内積は、$\int_{-1}^{1}P_1(x)P_2(x)dx=\int_{-1}^{1}x\cdot\dfrac{1}{2}\left(3x^2-1\right)dx=0$（奇関数と偶関数の積の形なので、積分範囲が $[-1,1]$ ならば実際に計算するまでもなく定積分値は 0 となる）。通常、ベクトル空間において内積が 0 となる 2 つのベクトルは直交する。これを踏まえて、関数の場合でも“$[-1,1]$ において $P_1(x)$ と $P_2(x)$ は直交する”という。

(3) α を正定数とする。$[-1,1]$ において $\alpha P_1(x)$ の大きさが 1 となるように α を定めよ。

ベクトルの大きさは自分自身との内積で定義されるから、$\alpha P_1(x)$ の大きさは $\alpha^2\int_{-1}^{1}P_1(x)P_1(x)dx=\alpha^2\int_{-1}^{1}x^2dx=\alpha^2\dfrac{2}{3}$。これが 1 となればよいから、$\alpha=\sqrt{\dfrac{3}{2}}$（題意より α は正定数）。ここで大きさを 1 とすることを、規格化（または正規化）という。

ちなみに $P_1(x),P_2(x)$ は 1 次及び 2 次のルジャンドル多項式であり、それらを規格化（正規化）したものは $\{1,x,x^2,\ldots\}$ を区間 $[-1,1]$ においてシュミットの直交化で求めた多項式群の 1 次と 2 次の多項式に一致する。

復習③正弦関数による任意関数の近似： $[-\pi,\pi]$ において積分可能な関数 $f(x)$ に対して、 $s_1(x)=b_1\sin x$ との差の 2 乗の和 $\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)-s_1(x_i)]^2\Delta_i$ を考える。但し x_i は $[-\pi,\pi]$ を n 分割したときの i 番目の分割区間の代表値、Δ_i はその分割幅である。$s_1(x)$ の係数 b_1 を $b_1=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin xdx$ と定めるとき、この和の $n\to\infty$ のときの収束値が最小になることを示せ。

$f(x)$ 及び $s_1(x)$ は $[-\pi,\pi]$ において積分可能であるので、 $\sum[f(x_i)-s_1(x_i)]^2\Delta_i\to\int_{-\pi}^{\pi}[f(x)-s_1(x)]^2dx \quad (\Delta_i\to 0)$。

$$\int_{-\pi}^{\pi}[f(x)-s_1(x)]^2dx=\int_{-\pi}^{\pi}\left[(f(x))^2-2f(x)b_1\sin x+(b_1\sin x)^2\right]dx=\int_{-\pi}^{\pi}(f(x))^2dx-2b_1\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin xdx+b_1{}^2\int_{-\pi}^{\pi}\sin^2 xdx$$

最後の式を b_1 の 2 次式と見れば、その 2 次の係数は正であるから $b_1=\dfrac{\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin xdx}{\int_{-\pi}^{\pi}\sin^2 xdx}=\dfrac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin xdx$ のときに最小となる。

ちなみに、関数の内積として考えると、 $\int_{-\pi}^{\pi}(f(x))^2dx$、 $\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin xdx$、 $\int_{-\pi}^{\pi}\sin^2 xdx=\pi$ は、それぞれ $[-\pi,\pi]$ における $f(x)$ の大きさの 2 乗、 $f(x)$ と $\sin x$ の内積、$\sin x$ の大きさの 2 乗になっている。
ここで、関数 $\sin x,\sin 2x,\sin 3x,\ldots\sin nx,\ldots$ は $[-\pi,\pi]$ において直交ベクトルとなっている（試しに内積を計算してみよ）。また、上の例において、b_1 の表式は復習①で求めた係数 p と同じ形式（内積の大きさを直交ベクトル（基底）の大きさの 2 乗で割ったもの）となっていることに注意せよ。

復習④正弦及び余弦関数による任意（周期）関数の展開： $[-\pi,\pi]$ において定義される関数 $f(x)=x$ のフーリエ級数を求めよ。

$[-\pi,\pi]$ において $\sin x,\ldots,\sin nx,\ldots$ は直交ベクトル系を成している（これらの間で内積を計算してみよ）。復習①の結果を踏まえると、この直交ベクトル系を基底とするとき、$[-\pi,\pi]$ で定義された任意の関数 $f(x)$（ベクトル）に対する $\sin nx$ の係数 b_n は、$f(x)$ と $\sin nx$ の内積を $\sin nx$ の大きさの 2 乗で割ったもので与えられる。従って、 $b_n=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin nxdx$ と表わされる。（本来、フーリエ級数展開において $[-\pi,\pi]$ における完備性（完全性）を満たすためには、 $\sin nx$ の項以外に定数項及び $\cos nx$ の項を考慮しなければいけない。しかしながら、 $f(x)=x$ は奇関数であり、幾何学的に考えても定数項や $\cos nx$ の項が含まれないことは容易に想像でき、また計算上も偶関数である定数項や $\cos nx$ の項と $f(x)=x$ の内積は零となることがすぐ分かるので、それらに関する係数は零となり、結局は定数項や $\cos nx$ の項（ベクトル）は $f(x)=x$ のフーリエ級数には含まれない。）

$$b_n=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin nxdx=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}x\sin nxdx=\frac{2}{\pi}\int_0^{\pi}x\left(-\frac{\cos nx}{n}\right)'dx=\frac{2}{\pi}\left[\frac{\sin nx}{n^2}-\frac{x\cos nx}{n}\right]_0^{\pi}=\frac{2}{n}(-1)^{n+1}$$

よって、

$$f(x)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{n}(-1)^{n+1}\sin nx=2\left(\sin x-\frac{1}{2}\sin 2x+\frac{1}{3}\sin 3x-\frac{1}{4}\sin 4x+\ldots\right)$$