

4 量子力学のための数学的準備 (I) … フーリエ変換とデルタ関数

前期量子論で明らかになってきた物質の波動論は周期運動に対する定常波 (Bohr-Sommerfeld の量子化の規則)、あるいは波数 k が一定の波 (de Broglie の物質波) に対するものでした。これらを基にして一般の物質の波動力学を構築していくには、一般の波がどのような波数の成分からなっているのかを分析する必要があります。ここでは波を波数ごとの成分に分解する方法であるフーリエ変換について学びます。

[4.A] Fourier(フーリエ) 変換

… x の関数 $f(x)$ と k の関数 $a(k)$ の間の指数関数を通じた変換

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} a(k) e^{ikx}, \quad a(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} f(x) e^{-ikx}.$$

[4.B] Dirac の δ (Delta) 関数

Note [4.A] の二つの式を組み合わせると、

$$f(x) = \int dy \delta(x-y) f(y), \quad \delta(x) \equiv \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx},$$

を得る。通常、第一式により、Dirac の δ 関数が定義される。

[4.C] 関数空間と関数の内積

Note [4.A] の結果は関数を $e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$ という基底で展開したものともみなせる。この考え方はベクトルと同様である。内積についてもベクトルと同様に定義でき、しばしばブラ・ケット ($\langle, \rangle$) を用いて表示される。

$$\langle f|g \rangle \equiv (f, g) \equiv \int dx f^*(x) g(x)$$

4. 例題 (Fourier 変換 — 関数 $f(x)$ の $\exp(ikx)$ による展開)

周期関数が 問題 [4.2] での展開式 Eq. (4.4) のように展開できることを既知とする。このとき、一般の関数が連続変数 k による指数関数 $\exp(ikx)$ により展開できることを示してみよう。

まず、Eq. (4.4) の第一式において、 $k_n = 2\pi n/L$ とおき、後の規格化に便利のように $\sqrt{2\pi}/L$ という因子をくり出しておくと、

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{2\pi}}{L} a_n e^{2\pi i n x / L} = \sum_n \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} a(k_n) e^{ik_n x}, \quad (4.1)$$

と表される。ただし、 $\Delta k = \boxed{\text{ア}}$ である。よって、 $\Delta k \rightarrow 0$ のとき、すなわち、 $\boxed{\text{イ}}$ のとき、これは、 k_n を連続変数と思った時の積分となる。

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} a(k) e^{ikx} \quad (4.2)$$

この積分変換は、 $a(k)$ が極限值を持つ場合に意味を持つ。Eq. (4.1) と Eq. (4.4) の第一式を、比較すると、 $a_n = \boxed{\text{ウ}} c_n$ であるから、 $\boxed{\text{イ}}$ の極限においては (すなわち、 k を連続変数とみた場合には)、

$$a(k) = \lim_{L \rightarrow \infty} a_n = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \boxed{\text{エ}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} f(x) e^{-ikx}, \quad (4.3)$$

となる。ただし、 $L \rightarrow \infty$ の極限は、オ を固定しておいて L, n を無限にする、という意味である。この積分は、極限值をもつため、方程式 Eq. (4.2) は意味を持つ。Eq. (4.2) を Fourier (フーリエ) 変換、Eq. (4.3) を Fourier 逆変換、とよぶ。

さて、関数に関しても、vector と同じように内積を定義してみよう。

$$(f, g) \equiv \int dx f^*(x) g(x)$$

ただし、積分範囲は周期関数の場合には $-L/2 \leq x \leq L/2$ 一般の関数の場合には $-\infty \leq x \leq \infty$ とする。まず、周期関数について、方程式 Eq. (4.1) の関数 $g(x)$ に関する展開係数を b_n とすると、この内積は カ となるので、確かに複素 vector の内積の表式と一致する (ただし、定数倍を除き、かつ無限次元)。この表式から再び連続極限を取ると、連続変数 k をもちいて、この内積は キ となる。

[4.1] (Fourier 級数— sin, cos による展開)

$-l \leq x \leq l$ で定義された関数 $f(x)$ がこの区間で $f(l) = f(-l)$ を満たし、かつ $f'(x)$ が不連続になる点が有限個しか無い場合、

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right)$$

の様に Fourier 級数に展開できる。このとき次の問に答えよ。

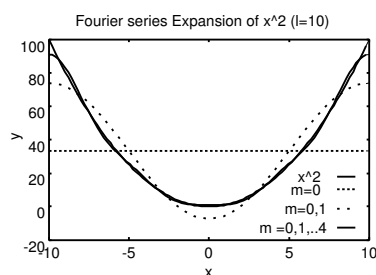
(1) 次の関係式を示せ。

$$a_m = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{m\pi x}{l} dx, \quad b_m = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{m\pi x}{l} dx.$$

(2) 次の関係式を示せ。

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^l |f(x)|^2 dx = \frac{1}{2}|a_0|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} (|a_n|^2 + |b_n|^2)$$

(3) $f(x) = x^2$ のとき、 a_0, a_m, b_m を求めよ。



[4.2] (Fourier 級数— exp による展開)

[4.1] の Fourier 級数は、exp による表現も可能である。 $L = 2l$ として、次の問に答えよ。

(1) Fourier 級数を次のように表現できる事を示せ。

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2\pi i n x / L}, \quad c_m = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) e^{-2\pi i m x / L} dx, \quad (4.4)$$

(2) 次の関係式を示せ。

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} |f(x)|^2 dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2$$

(3) $f(x) = x^2$ のとき、 c_m を求めよ。

[4.3] (Fourier 変換の例)

関数 $f(x)$ の Fourier 変換が次の $a(k)$ で与えられる時に、これを Fourier 逆変換して $f(x)$ を求めよ。また、 $|f(x)|^2$ の様子を図示せよ。

$$(1) \quad a(k) = \begin{cases} 1/\sqrt{2\Delta} & |k - k_0| < \Delta \\ 0 & |k - k_0| \geq \Delta \end{cases}$$

$$(2) \quad a(k) = (\pi\Delta^2)^{-1/4} \exp(-(k - k_0)^2/2\Delta^2)$$

[4.4] (Dirac の δ 関数)

Dirac の δ 関数は、「任意の連続関数 $f(x)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) dx = f(0) , \quad (4.5)$$

が成り立つ」としても定義される。

(1) Eq. (4.5) から、 $\delta(x)$ の次の標識を導け。ただし、Fourier 変換と Fourier 逆変換の関係は既知とする。

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx}$$

(ヒント: Eq. (4.5) において $f(x) = e^{-ikx}$ とすれば、これはどのような形になっているか?)

(2) Eq. (4.5) から次の関係式を示せ。(積分における変数変換は用いてよい。)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) f(x) dx = f(y)$$

[4.5] (関数に対する δ 関数)

一般に孤立した零点しかもたない関数 $f(x)$ に対して

$$\delta(f(x)) = \sum_i \left| \frac{df(x)}{dx} \right|^{-1} \delta(x - x_i), \quad (x_i; f(x) = 0 \text{ の解})$$

を示せ。これより、よく利用される次の関係が導かれる。

$$\delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x) \quad (4.6)$$

$$\delta(a^2 - x^2) = \frac{1}{2|a|} (\delta(x - a) + \delta(x + a)) \quad (4.7)$$

[4.6] (δ 関数の様々な表現)

一般に $\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx$ が有限であり、 $|x|$ が大きくなるにつれて十分速く減衰する関数 $g(x)$ に対して、

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{a g(ax)}{\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx} = \delta(x)$$

を示せ。特に、 δ 関数が以下のような関数の極限と考えられることを確かめよ。

$$\begin{aligned}
(1) \quad f(x) &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \begin{cases} 0 & |x| \geq \epsilon \\ 1/2\epsilon & |x| < \epsilon \end{cases} \\
(2) \quad f(x) &= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2} \\
(3) \quad f(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{1}{x - i\epsilon}
\end{aligned}$$

[4.7] (δ 関数の性質*)

δ 関数を、「任意の関数 $f(x)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(y-x) f(x) dx = f(y)$$

が成り立つ関数」と定義する。この定義から出発して以下の関係式が成立することを示せ。(部分積分は用いてよい。)

$$\begin{aligned}
(1) \quad \delta(x) &= \delta(-x) \\
(2) \quad \delta'(x) &= -\delta'(-x) \\
(3) \quad x\delta(x) &= 0 \\
(4) \quad x\delta'(x) &= -\delta(x) \\
(5) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x)\delta(x-b)dx &= \delta(a-b)
\end{aligned}$$

また、定義と (1)-(5) を用いて、以下の δ 関数に特徴的な関係式を示せ。

$$\begin{aligned}
(6) \quad \delta(x) &= 0 \quad (x \neq 0) \\
(7) \quad \delta(0) &= \infty \\
(8) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon'} \delta(x) dx = 1 \quad (\epsilon, \epsilon' > 0)
\end{aligned}$$

[4.8] (Gamma 関数*)

$\operatorname{Re}(z) > 0$ に対して Gamma 関数は

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt,$$

で定義される。

- (1) $\Gamma(n+1) = n!$ (n : integer) を示せ。
- (2) これを用いて次の関係式をしめせ。

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4},$$

- (3) $f(x) = (x^2 - \pi^2)^2$ を $-\pi \leq x \leq \pi$ の区間で Fourier 級数に展開せよ。結果は、

$$f(x) = \frac{8}{15} \pi^4 - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{48}{m^4} (-1)^m \cos mx,$$

となる。これより、

$$\zeta(4) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90},$$

を導け。(統計力学でしばしば現われる値である。)

[4.9] (正規直交系*)

次の関係を満たす関数系 $\{\phi_m(x)\}$ を正規直交関数系という。

$$(\phi_m, \phi_n) \equiv \int_a^b \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

$-\pi \leq x \leq \pi$ の区間で、次の関数系が正規直交系をなすことを示せ。

$$\begin{aligned} (1) \quad & \phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad \phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x, \quad \phi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x, \quad \dots, \\ & \phi_{2m}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos mx, \quad \phi_{2m+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin mx, \\ (2) \quad & \phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad \phi_1(x) = \frac{e^{ix}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \phi_{-1}(x) = \frac{e^{-ix}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \dots, \\ & \phi_m(x) = \frac{e^{imx}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \phi_{-m}(x) = \frac{e^{-imx}}{\sqrt{2\pi}}, \end{aligned}$$

量子力学レポート問題 4.

[R4.1] (Fourier 変換と Delta 関数)

問題 [4.4] で用いられた δ 関数の表現が、問題 [4.6] で与えられた関数の極限として表せることを確かめよう。

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk, \quad f(x) = \frac{\lim_{a \rightarrow \infty} a g(ax)}{\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx} = \delta(x) \quad (4.8)$$

(1) 次の関数を求めよ。

$$f(x; \Delta) = \int_{-\Delta}^{\Delta} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}$$

(2) 次の定積分の公式を証明せよ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x)}{x} dx = \pi$$

(3) 関数 $f(x; \Delta)$ が次の形で表されることをしめし、 $a, g(x)$ を求めよ。

$$f(x; \Delta) = \frac{a g(ax)}{\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx}$$

$\lim_{\Delta \rightarrow \infty} f(x; \Delta) = f(x)$ は明らかであるから、(4.8) の第 2 式から $f(x)$ が確かに Delta 関数となっていることがわかる。

