

デルタ関数 (ディラックのデルタ関数)

デルタ関数の定義

$$\delta(x) = \infty \quad x = 0 \text{ のとき}$$

$$0 \quad x \neq 0 \text{ のとき}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

デルタ関数の具体的な形の一例

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{\pi}} \exp(-n x^2) \quad \text{ガウス関数型}$$

これは、ガウス分布 $N(x, m, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp(-\frac{(x-m)^2}{2s^2})$ において極限をとる。

$$\delta(x - x_0) = \lim_{s \rightarrow 0} N(x, x_0, s) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp(-\frac{(x-x_0)^2}{2s^2})$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i k x) dk \quad \text{指数関数型}$$

これは、フーリエ変換、逆フーリエ変換の公式をつかう。

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-i k x) dx \quad \text{フーリエ変換}$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \exp(i k x) dx \quad \text{逆フーリエ変換}$$

において、 $F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i k x')$ (平面波)、および、 $f(x) = \delta(x - x')$ としたものの。

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i k (x - x')) dk$$

δ 関数の性質

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) \delta(x - b) dx = \delta(a - b)$$

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

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

$$x \delta(x) = 0$$

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

$$\delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x) \quad a \neq 0$$

$$\delta(x^2 - a^2) = [\delta(x - a) + \delta(x + a)]/(2a) \quad a > 0$$

ブラケット

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

$$\langle x | f(x) | x' \rangle = f(x) \delta(x - x')$$

■ $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(i x p/\hbar)$ とデルタ関数

$$\hat{x} | x \rangle = x | x \rangle \quad \hat{x} \text{ の固有関数 } | x \rangle, \text{ 固有値 } x$$

$$\hat{p} | p \rangle = p | p \rangle \quad \hat{p} \text{ の固有関数 } | p \rangle, \text{ 固有値 } p$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = 1, \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = 1 \quad \text{完全性}$$

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \langle p | p' \rangle = \delta(p - p') \quad \text{規格直交系}$$

すると、これらの状態ベクトルの内積は、

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ixp/\hbar), \langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-ixp/\hbar)$$

と表される。

正しいかどうか、指数関数型のデルタ関数 $\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik(x - x')) dk$ を用いて吟味してみる。

$$\langle x | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i(x - x')p/\hbar) dp \quad \leftarrow \text{内積を代入してみる}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i(x - x')k) dk \quad \leftarrow p = \hbar k$$

$$= \delta(x - x')$$

$$\langle p | p' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i(p' - p)x/\hbar) dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i(p' - p)k) dk \quad \leftarrow x = \hbar k$$

$$= \delta(p' - p)$$

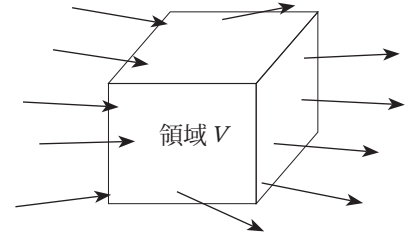
ガウスの定理とストークスの定理

ガウスの定理 (発散定理)

ガウスの定理とは発散 (div) に関する積分定理で、「ある体積内での湧き出し量と表面から出ていく量は等しい」というもの。

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{A} \, dV = \oint_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}$$

定理の左辺の意味は『領域 V 内全体で、新たに増えたり減ったりする流れの総量』を表わすと考えられる。一方、定理の右辺は『領域の表面 S 全域に渡る、 S を通過する流れの総量』を表わすものと考えられる。



この微小体積の湧き出しは、図に示すように微小面積 $dx dy$ の z 方向を考えると

$$A_z(x, y, z + dz) \, dx \, dy - A_z(x, y, z) \, dx \, dy$$

となる。

同様に $dy dz$ の x 方向、 $dz dx$ の y 方向の差をそれぞれ考えることで、次の式が得られる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} \, dx \, dy \, dz &= A_x(x + dx, y, z) \, dy \, dz - A_x(x, y, z) \, dy \, dz \\ &\quad + A_y(x, y + dy, z) \, dz \, dx - A_y(x, y, z) \, dz \, dx \\ &\quad + A_z(x, y, z + dz) \, dx \, dy - A_z(x, y, z) \, dx \, dy \end{aligned}$$

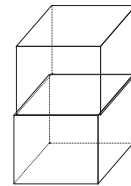
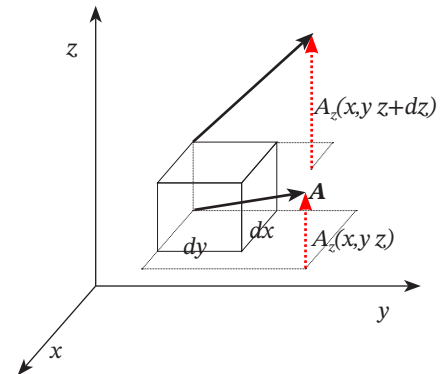
ここで、 $dx \, dy \, dz = dV$, $dy \, dz = dS_x$, $dz \, dx = dS_y$, $dx \, dy = dS_z$ より、

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} \, dV &= A_x(x + dx, y, z) \, dS_x - A_x(x, y, z) \, dS_x \\ &\quad + A_y(x, y + dy, z) \, dS_y - A_y(x, y, z) \, dS_y \\ &\quad + A_z(x, y, z + dz) \, dS_z - A_z(x, y, z) \, dS_z \end{aligned}$$

この式を体積積分すると、右辺はその表面をぐるりと足し合わせたものになる。たとえば、図のような積み重なった接合部分を考えると、 \mathbf{A} の出入りはちょうどその上下で打ち消し合う形となり、これを3方向でくり返していくと表面だけが残るというわけである。

つまり、

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{A} \, dV = \oint_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}$$



ストークスの定理

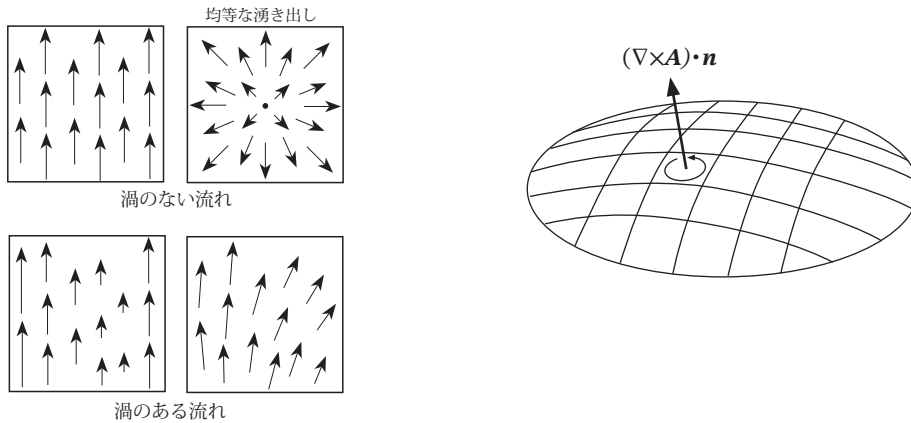
ストークスの定理とは回転 (rot) に関する積分定理で、「閉曲面に沿ってベクトルを線積分してものが、回転 (rot) を面積分したものに等しい」というもの。

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S} \quad d\mathbf{S} \text{ は } n dS \text{ を意味する。 } n \text{ は } S \text{ の単位法線ベクトル。}$$

$\nabla \times \mathbf{A}$ (= rot \mathbf{A}) は、渦 (回転) の強さをあらわしている。

わかりやすく例えてみると、川に浮かべた木の葉が回転もせず、真っ直ぐ流れていく場合は、流れに渦は無いといえる。一方、クルクル回りながら流れていく場合には、渦 (回転) が生じているわけだ。

ここでは、空間内の閉曲面を切り取って、その曲面上 (例えていうと川面) の渦を考えるということになる。



rot \mathbf{A} のイメージを得るために、図のような簡単な z 方向の渦を考えてみよう。(右ネジ回転を正回転としている。)

まず、ベクトル場 \mathbf{A} の y 軸方向だけに注目した流れを考えてみる。

このとき、x 座標が大きくなるにつれて、y 軸正方向のベクトル A_y が大きくなっていくことが正回転に寄与することから、y 軸方向だけ見たベクトルの渦の大きさは、

$$+ \partial A_y / \partial x$$

と表すことができる。

次に、x 軸方向だけに注目してみる。

y 座標が大きくなるにつれて、x 軸正方向のベクトル A_x が小さくなっていくことが正回転に寄与することから、x 軸方向だけ見たベクトルの渦の大きさは

$$- \partial A_x / \partial y$$

と表すことができる。

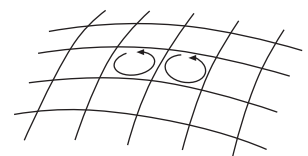
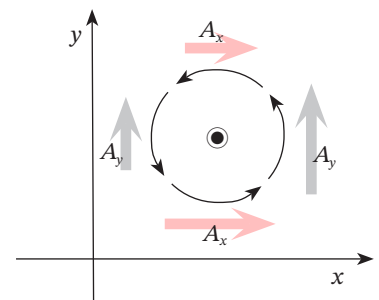
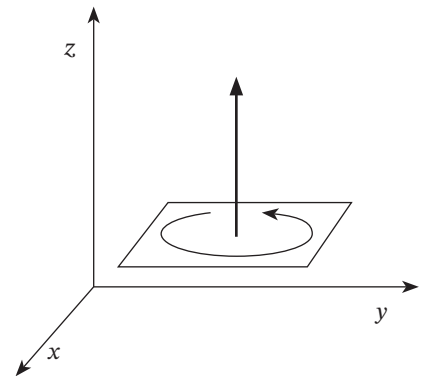
以上をまとめると、図のように「渦の向き」が z 軸正方向を向く渦の大きさは、2つを足しあわせて、以下のように表すことができる。

$$\partial A_y / \partial x - \partial A_x / \partial y$$

この値が大きいほど、「渦の向き」が z 軸方向のときの、渦の回転力が大きくなっていくというわけである。

これらを総合すると、 $\nabla \times \mathbf{A} = (\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y})$ が渦 (回転) の強さを表していることがわかるだろう。

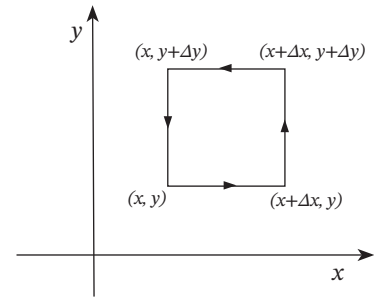
さて、この $\nabla \times \mathbf{A}$ の面積分を考えてみよう。ここでもガウスの定理のときと同じように、図のような2つのマスの接合部分に注目してみる。すると、ここでは渦は打ち消しあって、積分には寄与しなくなる。つまり、これを繰り返せば周辺だけが取り残されて、これが閉曲面の周辺での線積分になるというわけだ。



多少計算を加えておこう。

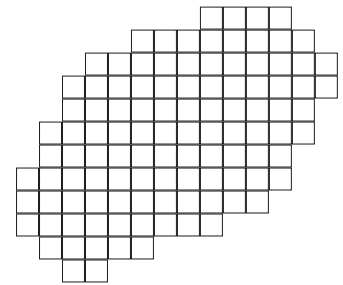
右図のような、二次元の平面曲線 c と、それによって囲まれる平面領域 S 上で考えてみる。

$$\begin{aligned} \oint_c \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} &= A_x(x, y) \Delta x + A_y(x+\Delta x, y) \Delta y + A_x(x, y) (-\Delta y) + A_x(x, y+\Delta y) (-\Delta x) \\ &= [A_x(x, y) - A_x(x, y+\Delta y)] \Delta x + [A_y(x+\Delta x, y) - A_y(x, y)] \Delta y \\ &= -\frac{\partial A_x(x, y)}{\partial y} \Delta y \Delta x + \frac{\partial A_y(x, y)}{\partial x} \Delta x \Delta y \\ &= \left(\frac{\partial A_y(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial A_x(x, y)}{\partial y} \right) \Delta x \Delta y \\ &= (\nabla \times \mathbf{A}(x, y))_z \Delta x \Delta y \end{aligned}$$



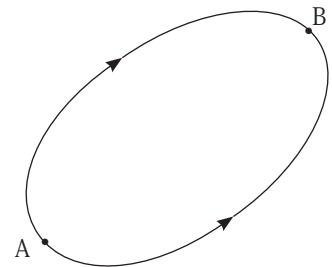
もう少し拡張して、閉曲線により囲まれた平面を微小な正方形に分割して考えてみると、隣り合わせの正方形上の線積分の方向は反対向きになっており、そのためこの部分の線積分は相殺し、隣り合う相手のない周辺上の線積分だけが残ることになる。

$$\begin{aligned} \oint_c \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} &= \sum_T (\nabla \times \mathbf{A}(x_i, y_i))_z \Delta x_i \Delta y_i \\ &= \int_S (\nabla \times \mathbf{A})_z dS \end{aligned}$$



ストークスの定理より、 $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ のとき、 $\oint_c \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = 0$

閉曲線のまわりの一周の線積分を、A 点から出発して B 点に至る二つの曲線と上の線積分に分解してみる。このとき、二点間の線積分が途中の道筋によらず一定の値をとるための必要十分条件は、 $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ で与えられる。



グリーン関数

<http://www.f-denshi.com/000TokiwaJPN/14bibnh/111deq.html>

グリーン関数 (Green's function) とは、微分方程式や偏微分方程式の解法の一つであるグリーン関数法に現れる関数のことである。

x に関する線形演算子 L を用いて次のように表すことができる微分方程式、

$$Ly(x) = q(x)$$

の解を形式的に (ある意味強引に)、

$$y(x) = L^{-1}q(x)$$

と書いたときの L の逆演算子 $L^{-1} \equiv G$ を **グリーン演算子** と言う。

このように都合のよい L^{-1} が、どうしたら得られるかが問題となる。

例えば、次のような線形演算子 L をとりあげてみる。

$$L = a(x) \frac{d}{dx^2} + b(x) \frac{d}{dx} + c(x)$$

$Ly(x) = q(x)$ を解きたいとき、まず以下の関数 $G(x, s)$ を探すことを試みる。

$$LG(x, s) = \delta(x-s)$$

そうすれば、次のような計算をすれば解 $y(x)$ が求まる。

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds$$

なぜなら、演算子 L を作用させると、

$$\begin{aligned} Ly(x) &= L \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} LG(x, s) q(s) ds \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-s) q(s) ds \\ &= q(x) \end{aligned}$$

このように、微分方程式 $Ly(x) = q(x)$ の形式解を、

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds$$

という形で表したときの $G(x, s)$ を **グリーン関数** と定義する。

つまり、方程式 $Ly(x) = q(x)$ を解くということは、 $LG(x, s) = \delta(s-x)$ となる $G(x, s)$ をもとめるということになる。

解は、 $y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds$ となる。

$$Ly(x) = q(x)$$

連続的に分布した力 $q(x)$ から極限移行によって、ただ 1 個の点 $x=s$ における $\delta(x-s)$ なる力を考える。

この孤立した力をうけたときの弦の変位を $G(x, s)$ とする。

$$LG(x, s) = \delta(x-s)$$

そして連続的に分布した力 $q(x)$ による影響は、孤立した力を合成したものと考えてのである。

こうして、求める弦は $y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds$ の形になる。

量子力学のブラ・ケット記法で表すと、

$$L|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

の左から L^{-1} をかけて ($L^{-1}L = I$ に注意して)、

$$|\alpha\rangle = L^{-1}|\beta\rangle = G|\beta\rangle$$

と書いたときの $G (= L^{-1})$ をグリーン演算子という。

その連続基底 $|x\rangle$ で展開した表現、

$$\langle x|\alpha\rangle = \langle x|G|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|G|x'\rangle \langle x'|\beta\rangle dx'$$

↓ ↑

$$\psi_\alpha(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x') \psi_\beta(x') dx'$$

における $\langle x | G | x' \rangle = G(x, x')$ をグリーン関数という。

物理学における例

【ポアソン方程式】

電磁気学におけるポアソン方程式は、 $L \equiv -\varepsilon \Delta$ の場合となる。

$$-\varepsilon \Delta \varphi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})$$

この方程式の解は、よく知られているように、

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

である。

これを先のグリーン関数の定義式 $y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, s) q(s) ds$ と比較すると、

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

が対応していることがわかる。

ここでのグリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は単位点電荷のポテンシャルであって、

$$LG(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\varepsilon \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

が成り立っている。もちろんこれは先の $LG(x, s) = \delta(x-s)$ に相当している。

きちんと解くとすると、まず積分方程式 $\varphi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ を仮定し、ポアソン方程式に代入するとグリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ の満たすべき式が得られる。

$$-\varepsilon \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

両辺をフーリエ変換すると、 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ のフーリエ変換 $g(\mathbf{k}, \mathbf{r}') = \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{k^2}$ が得られる。これを逆フーリエ変換するとグリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ が求まる。

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$