これまで解いてきた問題で、複雑な波動関数がいくつも登場してきた。これらの共通点は、いずれも、直交規格化されているということであった。この共通点から、複雑な波動関数をすべて統一的に捉えられないか考えてみよう。

(1) 多項式のベクトル空間で内積を

(A) 内積= $\int_{-1}^{1} A(x)B(x)dx$

(B) 内積= $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} A(x)B(x)dx$

(C) 内積= $\int_{0}^{+\infty} e^{-x} A(x)B(x)dx$

と定義して、シュミットの直交化法によって直交規格化された基本ベクトルを数個定めてみよ。 但し、一番目の基本ベクトルは x によらない定数とし、その値は内積の定義から規格化条件によって定める。また、このようにして求められた多項式(A)、(B)、(C)には何という名前がつけられているか参考書等で調べよ。

ヒント—シュミットの直交化法は、線形独立な複数のベクトル $\{a_0, a_1, a_2, \cdots\}$ を直交規格化して $\{C_0, C_1, C_2, \cdots\}$ を求める方法であるが、今の場合、$\{a_0, a_1, a_2, \cdots\} = \{x^0, x^1, x^2, \cdots\}$ である。たとえば、(A)であれば、まず、 a_0 を $1 = \int_{-1}^{+1} a_0^2 dx$ から規格化すれば $C_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ となる。次に C_1 を C_0 と直交するように、$C_1 \propto a_1 - (C_0, a_1)C_0 = x - \left(\int_{-1}^{+1} dx \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot x \right) \frac{1}{\sqrt{2}} = x - 0 = x$ と求め(シュミットの直交化)、規格化条件 $1 = \int_{-1}^{+1} (cx)^2 dx = \frac{c^2}{3} 2$ より $C_1 = \sqrt{\frac{3}{2}} x$ を得る。

(2) 自分で「怪しい」内積を定義して、上と同様に多項式の基本ベクトルを数個定めてみよ。なお、内積でなく、ノルム(絶対値のようなもの)を定義して、そこから内積を $\left|\vec{a} + \vec{b}\right|^2 = \left|\vec{a}\right|^2 + 2\vec{a} \cdot \vec{b} + \left|\vec{b}\right|^2$ の式から間接的に定義しても良い。

ヒント—怪しい内積やノルムの定義は、線型代数の教科書を見返してみよ。

後藤 (3-335B, gotoo-t@sophia.ac.jp)