物理数学演習 I (倉本)　　No.3　　2000 年 5 月 1 日

1．(3 重対角行列の行列式)　次のような対角成分とそれに隣接する成分以外の成分が 0 である行列を 3 重対角行列という．

$$
\begin{pmatrix}
a_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\
c_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
\vdots & \ddots & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\
0 & \dots & 0 & c_{n-1} & a_n
\end{pmatrix}
$$

3 重対角行列はいろいろな場面で登場する．以下ではその幾つかの性質を調べる．

(1)　基本的な $n \times n$ 3 重対角行列

$$
T = \begin{pmatrix}
0 & 1 & & & \\
1 & 0 & 1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & 1 & 0 & 1 \\
 & & & 1 & 0
\end{pmatrix}
$$

を考える．

$$
\boldsymbol{u}_j = {}^t\left(\sin\frac{j\pi}{n+1}, \sin\frac{2j\pi}{n+1}, \dots, \sin\frac{nj\pi}{n+1}\right) \ (j = 1, \dots, n)
$$

は T の固有ベクトルであることを示せ．またその固有値も求めよ．

(2)　次の $n \times n$ 3 重対角行列

$$
A = \begin{pmatrix}
a & b & & & \\
c & a & b & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & c & a & b \\
 & & & c & a
\end{pmatrix}, \ bc \neq 0
$$

は，適当な対角行列 P を用いて次のように変型できることを示せ．ただし I は単位行列である．

$$
P^{-1}AP = aI + rT, \ r^2 = bc
$$

(3)　A の固有値と固有ベクトルを求めよ．

2. (永年方程式 2: n 調和振動子) 固体中の弾性振動のモデルとして，$n+2$ 個の等質量 (m) の質点が直線上に並んでおり，隣あう質点が質量の無視できるバネ定数 k のバネで連結されている系の振動特性を考える．ただし簡単のため両端の質点は固定されており，運動は質点を結ぶ直線上に限られているものとする．

(1) 両端を除く各質点の平衡位置からの変位をそれぞれ $x_1,\dots,x_n$ とする．このとき各質点の運動方程式を書け．

(2) 解を $x_l = a_l e^{i\omega t}$ $(l=1,\dots,n)$ の形に仮定し，運動方程式を $(\omega^2 I - A)\boldsymbol{a} = 0$ の形で表せ．ここで A は $n\times n$ 行列，I は $n\times n$ 単位行列，$\boldsymbol{a} =^t (a_1,\dots,a_n)$ をあらわす．

(3) 永年方程式を解き，固有周期と固有ベクトルを求めよ．

3. (差分法による熱伝導方程式の解法) 1 次元の熱伝導方程式

$$\frac{\partial T(t,x)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(t,x)}{\partial x^2}$$

を離散化して (コンピュータで) 解く手法について考察する．ここで時間と空間の単位系を適当に変換し，熱拡散係数 κ は 1 とした．

(1) この方程式を 2 次元 (t,x) 空間上の間隔一定の 2 次元格子で離散化する．格子間隔をそれぞれ $t_{i+1}-t_i = h$， $x_{j+1}-x_j = k$ と置くことにする．h が時間ステップ幅，k が空間ステップ幅である．$T_{i,j}$ を $T(t_i, x_j)$ の近似値とすると，上記の方程式は

$$\frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{h} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{k^2} \tag{1}$$

と近似できることを示せ (注：もっとも近似のやり方はこの一つではないことに注意しておく)．

(2) 時間ステップ i での $T_{i,j}$ を j について並べたベクトル $\boldsymbol{u}^{(i)} =^t (T_{i,1}, T_{i,2},\dots,T_{i,n})$ を導入する．すると (1) の近似式は $n\times n$ 行列 A を導入して $\boldsymbol{u}^{(i+1)} = A\boldsymbol{u}^{(i)}$ と書くことができる．A を書き下せ．ただし境界条件 $T_{i,0} = T_{i,n+1} = 0$ がなりたつものとする．

(3) 式 (1) の解は $\boldsymbol{u}^{(i)} = A^i \boldsymbol{u}^{(0)}$ で与えられる．しかしこれがもとの熱伝導方程式の近似解になっているためには，ベクトル $\boldsymbol{u}^{(i)}$ のどの成分も $i\to\infty$ で発散するようなことがあってはならない．そのためには

$$\frac{h}{k^2} \le \frac{1}{2}$$

であることが条件となる．これを証明せよ (3 重対角行列の固有値を利用する)．

4. (結晶の対称性) 結晶を微視的に見ると，原子または分子が周期的に規則正しく並んでいる．このような周期性は3つの基本周期ベクトル $\boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2, \boldsymbol{t}_3$ により指定される．すなわち，結晶全体を

$$\boldsymbol{t}_n = n_1\boldsymbol{t}_1 + n_2\boldsymbol{t}_2 + n_3\boldsymbol{t}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 \text{ は任意の整数})$$

だけ並進させた場合，新しい位置における構造がもとの位置における構造と完全に重なる(この性質を並進対称性と言う)．

(1) 図のような基本構造が無限に積み重なった NaCl 結晶の場合，基本周期ベクトルはどのように取れば良いか．図中に記入せよ．

結晶は，並進対称性の他に，回転に対しても対称性を持っていることがある．回転の操作を C_n と表す．これは角度 $2\pi/n$ 回転させるという意味である．適当な軸の周りに回転操作 C_n を行った時，結晶の構造が回転前の構造と重なる場合，この結晶は n 回対称性を持つと呼ばれる．

(2) NaCl 結晶はどのような回転対称性を持つか．

(3) 一般に結晶がとりうる回転対称性は $1, 2, 3, 4, 6$ 回対称性のいずれかに限定されることを示せ．

5. (空間反転，極性ベクトルと軸性ベクトル)

(1) 図のように 3 枚の平面鏡を互いに垂直に張り合わせた反射鏡を作る．この反射鏡に入ってきた光線はどのような方向から入射しても，入射方向に平行な方向に反射されることを示せ (ただし光線は 3 枚の平面鏡で反射されるように入射するものとする)．

(2) この反射鏡に回転する小さなコマを写した場合，どのように見えるか．特に回転の向きはどのように変わるか．

6. (クロネッカーの記号，レビ・チビタの記号，和の規約) 添字 i, j, k は $1, 2, 3$ いずれかの番号をとるものとする．クロネッカーの記号 δ_{ij} とレビ・チビタの記号 ε_{ijk} は以下のように定義される．

$i \neq j$ のとき	$\delta_{ij} = 0$
$i = j$ のとき	$\delta_{ij} = 1$
ijk が 123 の偶置換とき	$\varepsilon_{ijk} = 1$
ijk が 123 の奇置換とき	$\varepsilon_{ijk} = -1$
2 つ以上の添字が同じ番号のとき	$\varepsilon_{ijk} = 0$

和の規約とは，項の中に同じ添字記号があらわれたら，その取りうるすべての番号について自動的に和をとることを言う．例えば 3 次元直交座標における 2 つのベクトル $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, a_3)$ と $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, b_3)$ の内積は

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i$$

が定義だが，和の規約を用いると簡潔に

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_i b_i$$

とあらわされる．

このとき以下の等式が成り立つことを示せ．

(1) $\delta_{ii} = 3$ (2) $\delta_{ij}\delta_{ik} = \delta_{jk}$ (3) $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \delta_{ij} a_i b_j$ (4) $\delta_{ij}\varepsilon_{ijk} = 0$ (5) $\varepsilon_{ipq}\varepsilon_{jpq} = 2\delta_{ij}$

(6) $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 6$ (7) $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{pqk} = \delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp}$

おいおい分かるように，これらの記号と和の規約を用いると，さまざまな式変型を容易に行うことができる．