

9-5 行列力学

126

9-5-1 Schrödinger 方程式の行列解

状態 $u_n(x)$ とする (1次元系)

↓
これが「完全規格直交系」と仮定する

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ 直交性: } \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_m(x) dx = \delta_{nm} \\ \bullet \text{ 完全性: } \sum_n u_n(x) u_n^*(x') = \delta(x-x') \end{array} \right.$$

• Schrödinger 方程式の行列表示

(i) オペレータ $\hat{A}$ の行列表示

$$\langle n | \hat{A} | m \rangle \equiv A_{nm} \equiv \int \psi_n^*(x) \hat{A} \psi_m(x) dx$$

(ii) $\psi(x)$ は完全規格直交系に展開可能

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u_n(x)$$

この $\psi(x)$ を Schrödinger 方程式
に代入する

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=0}^{\infty} a_n U_n''(x) + \sum_{n=0}^{\infty} a_n V(x) U_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} E a_n U_n(x)$$

2の式に左から $U_m^*(x)$ をかけ x を積分すると

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^*(x) U_n''(x) dx \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^*(x) V(x) U_n(x) dx = E a_m \end{aligned}$$

$$\text{2.2.2} \quad \begin{cases} T_{mn} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} U_m^*(x) U_n''(x) dx \\ V_{mn} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} U_m^*(x) V(x) U_n(x) dx \end{cases}$$

と定義する。この時、 T_{mn} , V_{mn} は行列表示に2つの行列要素に対応する

$$\therefore \sum_{n=0}^{\infty} [T_{mn} + V_{mn} - E \delta_{mn}] a_n = 0 \quad \text{2.2.3}$$

a_n は non-zero の解となるためには行列式の値が0

$$\det(T_{mn} + V_{mn} - E \delta_{mn}) = 0$$

2.2.4 固有値 E を求める