行列力学

2016 年 2 月 21 日

1　この章の目的

前章では，シュレディンガー方程式を微分方程式として解いたが，実はハミルトニアンを行列，波動関数をベクトルとして解くことが可能である．この章ではまず，関数とベクトルが等価であることを示し，各種必要な事項を説明する．それから，シュレディンガー方程式を行列表示して解いていくことを目標とする．

2　ベクトルと関数の等価性

ある関数の集まりでどのような関数でも表現できるとき，その関数の集まりを**完全系**と呼ぶ．例えば，フーリエ級数[*1]では関数 $f(x)$ を次のように展開できる．

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} \tag{1}$$

このとき使用している関数の集まり（これを関数系と呼ぶ）は

$$\{1, \cos(x), \sin(x), \cos(2x), \sin(2x), \cdots\} \tag{2}$$

であり，それらの関数と掛け合わされる係数は

$$\left\{\frac{a_0}{2}, a_1, b_1, a_2, b_2, \cdots\right\} \tag{3}$$

である．(2) 式以外にも完全系が存在するが，一般的な完全系を

$$\{u_1(x), u_2(x), u_3(x), \cdots\} \tag{4}$$

と表す．このときの係数

$$(c_1, c_2, c_3, \cdots) \tag{5}$$

は，ベクトルとみなすことができる．つまり，無限次元のベクトルと関数は等価であるといえる．

3　波動関数の性質

3.1　完全系

定常状態のシュレディンガー方程式は固有値問題[*2]と同じ形になっている．つまり，ある行列 A とベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して，

$$A\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x} \tag{6}$$

となるような固有値 λ を求める問題としてシュレディンガー方程式を扱うことができる．ベクトルと関数が等価であることはすでに述べた通りである．すなわち，(6) 式の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ はシュレディンガー方程式における波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ にあたる．（これより，波動関数を**固有関数**と呼ぶこともある．）また，固有値 λ はエネルギー ε にあたる．

[*1] 応用数学 II - 「フーリエ級数」
[*2] 線形代数 II - 「固有値と固有ベクトル」

第 3 章の井戸型ポテンシャルや調和振動子の問題では，基底状態や第 n 励起状態の波動関数を求めた．基底状態や励起状態など，ある 1 つの状態を表す波動関数（固有関数）を $u_1(\boldsymbol{r}), u_2(\boldsymbol{r}), \cdots, u_n(\boldsymbol{r}), \cdots$ とすると，一般の波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は次のように固有関数の線形結合で表すことができる．

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = c_1(t)u_1(\boldsymbol{r}) + c_2(t)u_2(\boldsymbol{r}) + \cdots + c_n(t)u_n(\boldsymbol{r}) + \cdots \tag{7}$$

つまり，各状態の波動関数が完全系であるとこの式は主張している．またこの式は，各状態の波動関数を重ね合わせているともいえる．

3.2 規格直交系

直交とは一言でいうと内積が 0 になるということである．関数の内積は以下のように計算できる．

$$\int_a^b u_n^*(x)u_m(x)\mathrm{d}x \tag{8}$$

$u_m(x), u_n(x)$ は区間 $[a, b]$ で定義される複素関数であり，$u_n^*(x)$ は $u_n(x)$ の複素共役である．$m = n$ としたときは

$$\int_a^b |\, u_n(x)\,|^2 \mathrm{d}x \tag{9}$$

となる．$u_m(x)$ と $u_n(x)$ が直交であるとは，$n \fallingdotseq m$ のときに (8) 式が 0 になり，$n = m$ のときには 0 でない数になるということである．また，第 3 章で波動関数を求めた際に，関数の絶対値の 2 乗の積分が 1 となるよう，関数に掛かる係数を調整することを規格化と呼ぶことを説明した．[*3]固有関数が規格化されているとすると，(9) 式は 1 になる．固有関数が規格直交系であるということを 1 つの式で表すと以下のようになる．

$$\int_a^b u_n^*(x)u_m(x)\mathrm{d}x = \delta_{nm} \tag{10}$$

δ_{nm} はクロネッカーのデルタと呼ばれ，次のような関係を満たす．

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \fallingdotseq m) \end{cases} \tag{11}$$

以降の説明では，波動関数が完全規格直交系であることを前提とする．

4 ブラケット

ある物理量 F の期待値は

$$\int \Psi^*(q)F\Psi(q)\mathrm{d}q \tag{12}$$

で計算できる．物理量 F には位置 q や運動量 $p\left(= -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q}\right)$，エネルギー $\varepsilon\left(= i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\right)$ などが入る．この期待値の計算を，ディラックは以下のように書き表した．

$$\int \Psi^*(q)F\Psi(q)\mathrm{d}q = \langle\Psi|F|\Psi\rangle \tag{13}$$

$\langle\Psi|$ の部分を**ブラベクトル**（単に**ブラ**ともいう），$|\Psi\rangle$ の部分を**ケットベクトル**（単に**ケット**とも）と呼ぶ．ディラックはまた，次のような表示記号も作った．

$$\int f^* g dq = \langle f|g\rangle \tag{14}$$

[*3] 規格化（normalization）は正規化ともいう．よって，規格直交系は正規直交系ともいう．

$$\int \Psi_n^*(q) F \Psi_m(q) \mathrm{d}q = \langle \Psi_n | F | \Psi_m \rangle \tag{15}$$

$$= \langle n | F | m \rangle \tag{16}$$

(14) 式は (8) 式より，内積を表していることがわかる．また，(16) 式の書き方を期待値の計算に適用すると，

$$\int \Psi_n^*(q) F \Psi_n(q) \mathrm{d}q = \langle n | F | n \rangle \tag{17}$$

であるが，これをさらに略して

$$\langle F \rangle \tag{18}$$

と表すことが多い．

次に，ブラベクトルとケットベクトルが具体的にどのような形のベクトルになるのかを見ていく．波動関数 ψ とその複素共役 ψ^* を，固有関数 u_n, u_n^* と係数 c_n, c_n^* を用いて以下のように表す．

$$\psi = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \cdots + c_n u_n + \cdots \tag{19}$$

$$\psi^* = c_1^* u_1^* + c_2^* u_2^* + \cdots + c_n^* u_n^* + \cdots \tag{20}$$

係数の部分がベクトルの要素になることは本章第 1 節で説明したとおりである．ケットベクトルは ψ にあたり，

$$\psi = |\psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{21}$$

というように縦ベクトルで表される．一方ブラベクトルは ψ^* にあたり，

$$\psi^* = \langle \psi | = \begin{bmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots & c_n^* & \cdots \end{bmatrix} \tag{22}$$

と横ベクトルで表される．$|\psi\rangle$ と $\langle\psi|$ は複素共役をとり，転置した関係になっている．このような関係を**エルミート共役**あるいは随伴という．エルミート共役であることを表す記号"†"は「ダガー」と読み，次のように用いる．

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle \psi | \tag{23}$$

また，波動関数の内積は

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^* \psi \mathrm{d}q = \int |\psi|^2 \mathrm{d}q \tag{24}$$

となり，存在確率を表すことがわかる．

5 演算子の行列表示

5.1 交換関係

ある演算子 A, B を使って次のような記号を定義する．

$$[A, B] = AB - BA \tag{25}$$

$[A, B]$ を**交換子** (commutator) と呼び，演算子 A, B の交換関係を示す．

ここで，位置 q と運動量 p の交換関係を求めてみる．波動関数 ψ を使って計算を行う．$p = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$ であることに注意して計算すると

$$[q, p]\psi = qp\psi - pq\psi \tag{26}$$

$$= -i\hbar q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\psi + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}(q\psi) \tag{27}$$

$$= -i\hbar q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\psi + i\hbar\psi + i\hbar q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\psi \tag{28}$$

$$= i\hbar\psi \tag{29}$$

両辺の ψ を除くと

$$[q, p] = qp - pq = i\hbar \tag{30}$$

という関係を得る．この式に再び $p = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$ を代入する．

$$-i\hbar q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}q = i\hbar \tag{31}$$

両辺の $i\hbar$ を除くと，交換関係

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}, q\right] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}q - q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} = 1 \tag{32}$$

を得る．また，第 3 章の調和振動子の問題において

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q \tag{33}$$

と変数変換したが，このときの $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$ と $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ の関係は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \tag{34}$$

であった．これを (32) 式に代入して (33) 式の関係を用いれば

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \xi\right] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi - \xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = 1 \tag{35}$$

という関係を得る．

(34) 式 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ と $p = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$ を使うと

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = i\frac{p}{\hbar} \tag{36}$$

となり，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ は次の形で表される．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = \frac{ip}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{37}$$

この式と (33) 式を生成消滅演算子

$$b^+ = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right), \qquad b = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right) \tag{38}$$

に代入すると

$$b^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q - \frac{i}{m\omega}p\right), \qquad b = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q + \frac{i}{m\omega}p\right) \tag{39}$$

となり，生成消滅演算子を位置と運動量 q, p で表すことができた．

逆に，b^+, b を使って q, p を表すには，(39) 式を使えばよく，計算すると以下のようになる．

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b^+ + b), \qquad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(b^+ - b) \tag{40}$$

5.2 位置 q と運動量 p の行列表示

まず生成消滅演算子 b^+, b の行列表示を求め，それと (40) 式から位置と運動量 q, p の行列表示を求めていく．固有関数を ϕ とすると，第 n 励起状態（以降「n 状態」と呼ぶ）の固有関数 ϕ_n は第 3 章の調和振動子の結果より次のように表せる．

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n\phi_0 \tag{41}$$

また，$(n+1)$ 状態の固有関数は，n 状態の式を用いれば次のように計算できる．

$$\phi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}(b^+)^{n+1}\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\frac{1}{\sqrt{n!}}b^+(b^+)^n\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{n+1}}b^+\phi_n \tag{42}$$

ケット記号を使えばこの式は次のように書ける．

$$|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,|b^+\phi_n\rangle \tag{43}$$

この式に左から $\langle\phi_{n+1}|$ をかけると

$$\langle\phi_{n+1}|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,\langle\phi_{n+1}|b^+\phi_n\rangle \tag{44}$$

規格直交系であることを利用すれば左辺は 1 になるので

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}}\,\langle\phi_{n+1}|b^+\phi_n\rangle = 1 \tag{45}$$

となる．よって次の式を得る．

$$\langle\phi_{n+1}|b^+\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} \tag{46}$$

この式の左辺のブラケット記号は積分記号を使うと次のようになる．

$$\langle\phi_{n+1}|b^+\phi_n\rangle = \int \phi^*_{n+1}b^+\phi_n\mathrm{d}q \tag{47}$$

ϕ_{n+1}, ϕ_n を基底ベクトル[*4]と考えると，(47) 式の右辺は b^+ の行列要素として $b^+_{n+1,n}$ と書くことができる．[*5]よって，(46) 式を使うと行列要素 $b^+_{n+1,n}$ は次のように表される．

$$b^+_{n+1,n} = \sqrt{n+1} \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{48}$$

[*4] 数学特論 I - 「部分空間の基底・次元」

[*5] 用語解説「行列要素の表記法」参照

b^+ の行列要素を行列の形で具体的に書くと

$$b^+ \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{49}$$

となる．行列の形にするときには，$b^+_{n+1,n}$ の添字が 0 になるときに 1 行目，1 列目としている点に注意が必要である．

次に消滅演算子の行列表示を考える．(39) 式から b^+ と b は複素共役の関係になっている．よって次の関係が成り立つ．

$$b^+ = (b)^* \tag{50}$$

関数で複素共役の関係にあるならば，ベクトルに置き換えると (23) 式のようにエルミート共役の関係になる．したがって，消滅演算子 b は生成演算子 b^+ のエルミート共役であり，その行列表示は

$$b \to \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{51}$$

となる．

(40) 式より，位置と運動量 q, p は生成消滅演算子の和，差で表されるので，その行列表示を求める．

$$b^+ + b \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{52}$$

$$b^+ - b \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{53}$$

したがって q, p は係数 $\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}$ や $i\sqrt{\dfrac{\hbar m\omega}{2}}$ をかけて以下のように求まる．

$$q \to \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{54}$$

$$p \to i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{55}$$

6　シュレディンガー方程式の行列表示

6.1　n 状態の固有方程式のハミルトニアン

波動関数 ψ の行列表示（ベクトル表示）については本章第 4 節で説明したとおり，固有関数を u_n，係数を c_n とすると

$$\psi = u_1 c_1 + u_2 c_2 + \cdots + u_n c_n \tag{56}$$

と展開できるので，

$$\psi \to \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{57}$$

と縦ベクトルで表せる．[*6]

n 状態のハミルトニアンの行列表示を求める．そのために n 状態の固有関数の固有方程式を考える．

$$Hu_n = f_n u_n \tag{58}$$

f_n は u_n の固有値を表す．(58) 式の左から u_m^* をかけると次のようになる．

$$u_m^* H u_n = u_m^* f_n u_n = f_n u_m^* u_n \tag{59}$$

この式の内積を計算する（q で積分する）と，規格直交系であることを利用して

$$\int u_m^* H u_n \mathrm{d}q = f_n \int u_m^* u_n \mathrm{d}q = f_n \delta_{nm} \tag{60}$$

となる．ブラケット記号を使うと，$n = m$ のときのみ固有値 f_n が値を持つことから次のように表せる．

$$f_n = \langle u_n | H | u_n \rangle = \langle n | H | n \rangle \tag{61}$$

$\langle u_n|$ と $|u_n\rangle$ を基底ベクトルとみなせば，

$$\langle u_n | H | u_n \rangle = H_{nn} \tag{62}$$

と H の行列要素で表せる．[*7] よって，

$$H_{nm} = \delta_{nm} f_n \tag{63}$$

の関係を満たすので，ハミルトニアン H の行列表示は以下のようになる．

$$H \to \begin{bmatrix} f_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & f_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & f_n \end{bmatrix} \tag{64}$$

したがって，固有値方程式が (58) 式 $Hu_n = f_n u_n$ の関係を満たすときにハミルトニアンは (72) 式のような対角行列で表されることがわかった．

[*6] 無限次元に展開すれば関数と等しくなるが，ここでは n 次元で展開しているのであくまで近似的に等しくなっている．
[*7] 用語解説「行列要素の表記法」参照

6.2 シュレディンガー方程式のハミルトニアン

シュレディンガー方程式

$$H\psi = \varepsilon\psi \tag{65}$$

を以下のように行列表示する.

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{66}$$

このときにハミルトニアン H が具体的にどのような形になるのか求めていく.

まず，物理量が観測可能であるためには，固有値が実数とならなければならない．固有値が実数となるためには，H が次の条件を満たす必要がある.

$$H^\dagger = H \tag{67}$$

この式は H のエルミート共役が H 自身に等しいということを示しているが，この関係を満たす行列を**エルミート行列**と呼ぶ．(72) 式に求めた，n 状態のときのハミルトニアンはエルミート行列となっているが，一般的にはエルミート行列にならない．行列力学の問題として，物理量が行列の形で与えられたときエネルギー（固有値）を求めるというものがあるが，このときには与えられたハミルトニアンを対角化[*8]する必要がある.

6.3 調和振動子のハミルトニアンと固有値

調和振動子のハミルトニアンは，第 3 章より

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{68}$$

であった．また，運動量の 2 乗演算子 $p^2 \to -\hbar^2 \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ を使ってこれを書き換えると次のようになる.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{69}$$

p^2 と q^2 の行列表示は，(54) 式，(55) 式を 2 乗して求められる.

$$p^2 \to \frac{\hbar m\omega}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \cdots \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & -\sqrt{12} & \cdots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{12} & 0 & 9 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{70}$$

$$q^2 \to \frac{\hbar}{2m\omega}\begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{12} & \cdots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{12} & 0 & 9 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{71}$$

[*8] 線形代数 II - 「行列の対角化」

これらを (69) 式に代入すると，右辺各項の係数がどちらも $\dfrac{\hbar\omega}{4}$ となるので足し算ができ，実行すると以下のようになる．

$$H \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2}\hbar\omega & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{9}{2}\hbar\omega & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{72}$$

シュレディンガー方程式に当てはめると

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2}\hbar\omega & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{9}{2}\hbar\omega & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ \vdots \end{bmatrix} = \varepsilon_n \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{73}$$

となるので，固有値（エネルギー）は

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \cdots) \tag{74}$$

と求めることができる．

参考文献

[1] 岸野 正剛. **納得しながら 量子力学**. 朝倉書店, 2013.

[2] 小出 昭一郎 and 水野 幸夫. **量子力学演習**. 裳華房, 1978.

[3] **完全規格直交系**. URL: `http://eman-physics.net/quantum/orthogonal.html` (visited on 02/16/2016).