# 量子力学:特殊関数と固有ベクトル

谷村吉隆

*京都大学理学研究科化学専攻*

*http:theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp*

TA: 岩元佑樹

*iwamoto.y@kuchem.kyoto-u.ac.jp*

# 座標系をうまく選ぶと記述が簡単化

**列ベクトル**

$$\mathbf{A}=\begin{array}{c}\left[\begin{array}{c} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \end{array}\right]\end{array}\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{array}$$

**ベクトルA上に座標を移す変換があったとする**

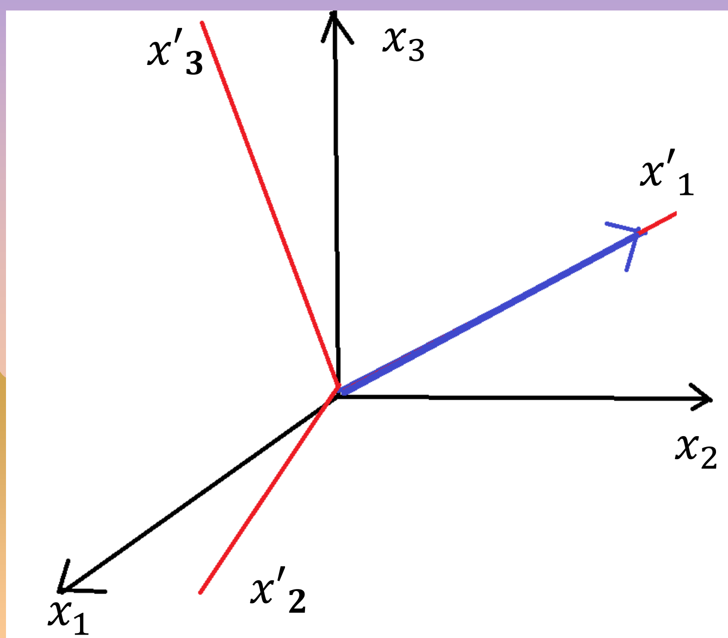
$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

**これにより**

$$\mathbf{A}=\left[\begin{array}{c} f(t) \\ 0 \\ 0 \end{array}\right]\begin{array}{c} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{array}$$

**ここで**

$$f(t)=\sqrt{c_1^2(t)+c_2^2(t)+c_3^3(t)}$$




**新しい単位座標のベクトルを古い座標で表すと**

$$\mathbf{x}'_1=\left[\begin{array}{c} a \\ d \\ g \end{array}\right]\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{array}\quad \mathbf{x}'_2=\left[\begin{array}{c} b \\ e \\ h \end{array}\right]\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{array}\quad \mathbf{x}'_3=\left[\begin{array}{c} c \\ f \\ i \end{array}\right]\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{array}$$

**同じベクトルでも座標系の選び方で表記が簡単**

$$\mathbf{A}=c_1(t)\mathbf{x}_1+c_2(t)\mathbf{x}_2+c_3(t)\mathbf{x}_3$$

$$\mathbf{A}=f(t)\mathbf{x}'_1$$

# 逆行列と行列式

- ２行２列の場合

2行2列の行列

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$ に対し行列式は $$|\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

行列式を用いると、逆行列は

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$

で定義される。逆行列をもとの行列にかけると単位行列になる。

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

# 固有値の計算（２×２行列）

固有方程式　$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

または

$$\begin{bmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0$$

を満たすλを求める。式が $\mathbf{x}=0$ 以外で成立するには逆行列が存在してはいけないから。

$$\begin{vmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{vmatrix} = (a-\lambda)(d-\lambda) - bc = 0$$

を満たすλを求めれば、それが固有値。

$$\lambda_{\pm} = \frac{(a+d) \pm \sqrt{a^2 - 2ad - 4bc + d^2}}{2}$$

# 固有ベクトルの計算（２×２行列）

求まったλを固有方程式に代入して

$$\begin{bmatrix} a-\lambda_{\pm} & b \\ c & d-\lambda_{\pm} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0$$ より $$\begin{aligned} (a-\lambda_{\pm})x_1 + bx_2 = 0 \\ cx_1 + (d-\lambda_{\pm})x_2 = 0 \end{aligned}$$

を満たす連立方程式を解いて、x、yを求めると

$$x_1^{\pm} = -\frac{b}{a-\lambda_{\pm}}x_2^{\pm}$$

を満たすxが固有ベクトルになる。（長さが1とする規格化はされてない。）

２つの固有ベクトルは、座標を1次変換する行列Aを作用させても方向がかわらない。
また、ベクトル同士は直交している。

# ユニタリー行列と座標変換

固有方程式 $\mathbf{A}\mathbf{x}^{\pm} = \lambda_{\pm}\mathbf{x}^{\pm}$

ユニタリー行列：固有ベクトルを並べて作った行列
（ここでx、yは規格化済）

$$\mathbf{x}^{+} = \begin{bmatrix} x_1^{+} \\ x_2^{+} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^{-} = \begin{bmatrix} x_1^{-} \\ x_2^{-} \end{bmatrix} \qquad \hat{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} x_1^{+} & x_1^{-} \\ x_2^{+} & x_2^{-} \end{bmatrix}$$

ユニタリー共役な行列（共役複素転置行列、行と列を入れ替え複素共役をとる）

$$\mathbf{U}^{\dagger} = \begin{bmatrix} x_1^{+\dagger} & x_2^{+\dagger} \\ x_1^{-\dagger} & x_2^{-\dagger} \end{bmatrix}$$

元の行列と掛け合わせると、単位行列になる

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \begin{bmatrix} x_1^{+\dagger} & x_2^{+\dagger} \\ x_1^{-\dagger} & x_2^{-\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{+} & x_1^{-} \\ x_2^{+} & x_2^{-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left|x_1^{+}\right|^2 + \left|x_2^{+}\right|^2 & x_1^{+\dagger}x_1^{-} + x_2^{+\dagger}x_2^{-} \\ x_1^{-\dagger}x_1^{+} + x_2^{-\dagger}x_2^{+} & \left|x_1^{-}\right|^2 + \left|x_2^{-}\right|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \mathbf{I} \qquad \mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1}$$

共役複素転置行列が
逆行列になっている。

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{I}$$

# 行列の対角化

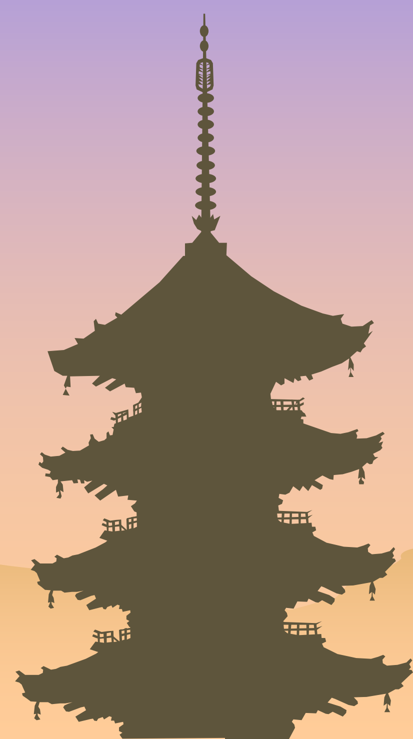
**行列を対2つのユニタリー行列で挟むと(ユニタリー変換)**

$$\begin{bmatrix} x_1^{+\dagger} & x_2^{+\dagger} \\ x_1^{-\dagger} & x_2^{-\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{+} & x_1^{-} \\ x_2^{+} & x_2^{-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^{+\dagger} & x_2^{+\dagger} \\ x_1^{-\dagger} & x_2^{-\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_+ x_1^{+} & \lambda_- x_1^{-} \\ \lambda_+ x_2^{+} & \lambda_- x_2^{-} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix}$$

ユニタリー変換で行列は対角化される。

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} \qquad \mathbf{A}' = \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix}$$



# エルミート行列

Charles Hermite
1822－1901

ユニタリー変換

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{A}\mathbf{U} \qquad \mathbf{A}' = \begin{bmatrix} \lambda_{+} & 0 \\ 0 & \lambda_{-} \end{bmatrix}$$

その共役複素転置（行と列を入れ替えて、複素共役を取る）は

$$\mathbf{A}'^{\dagger} = \mathbf{U}\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{U}^{\dagger} \qquad \mathbf{A}'^{\dagger} = \begin{bmatrix} \lambda_{+}^{*} & 0 \\ 0 & \lambda_{-}^{*} \end{bmatrix}$$

もしAの共役複素転置行列が同じ（$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\dagger}$）なら同じ（エルミート行列）

$$\mathbf{A}'^{\dagger} = \mathbf{U}\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{A}'$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{\dagger}$$

ハミルトニアンは
エルミート共役

$$\mathbf{A}'^{\dagger} = \mathbf{A}'$$

固有値は実

# ユニタリー変換と座標変換

**元の基底の行列**

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & \cdots \end{array} \\ \mathbf{A} = & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ a_{31} & a_{32} & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \end{array}$$

**元の基底**

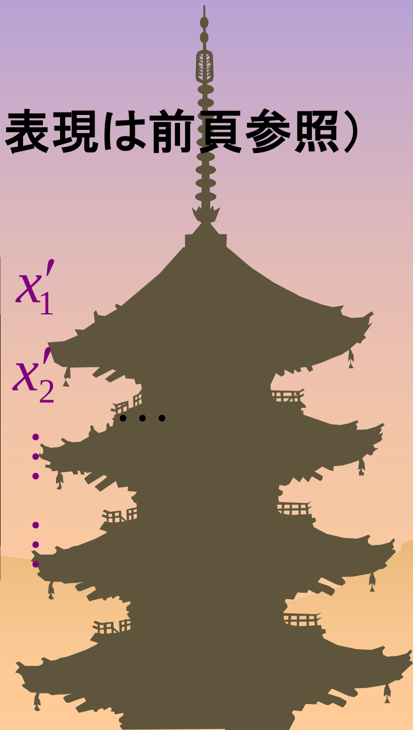
$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \qquad \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \qquad \cdots$$

**固有ベクトルを基底に選んだ行列**

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} x_1' & x_2' & \cdots & \cdots \end{array} \\ \mathbf{A}' = & \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \end{array}$$

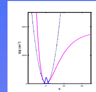
**新しい基底（元に基底での表現は前頁参照）**

$$\mathbf{x}_1' = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \qquad \mathbf{x}_2' = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{array}{c} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \qquad \cdots$$

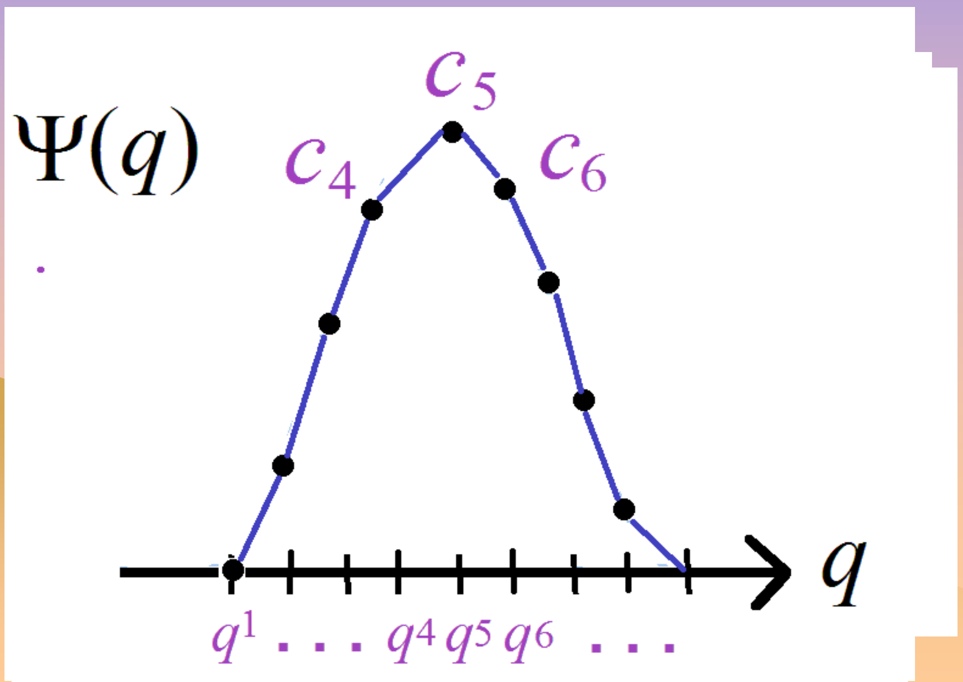


# 調和振動子（バネ）ポテンシャル

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q,t)=\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+\frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right]\Psi(q,t)$$



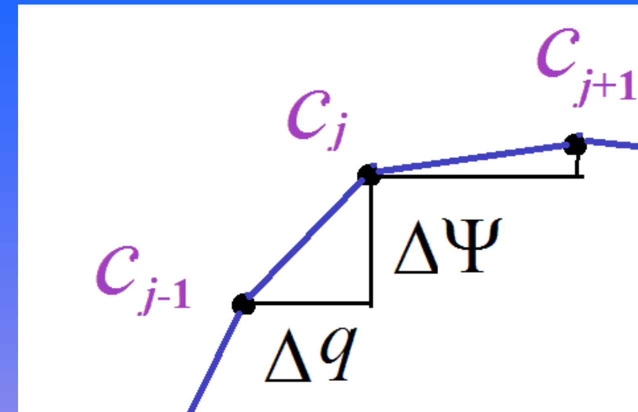
**数値計算のために、波動関数をメッシュを切って表す**




**列ベクトル**

$$\mathbf{\Psi}(t)=\begin{array}{c}\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_{j-1}(t) \\ c_j(t) \\ c_{j+1}(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{bmatrix}\end{array}\begin{array}{c} q^1 \\ q^2 \\ \vdots \\ q^{j-1} \\ q^j \\ q^{j+1} \\ \vdots \\ q^N \end{array}$$

# 微分を差分で書くと



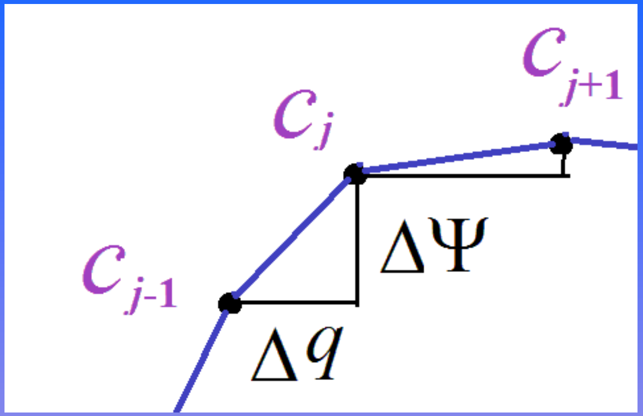

$$\frac{\partial \Psi(q_j)}{\partial q} \to \frac{c_j(t) - c_{j-1}(t)}{\Delta q}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(q_j)}{\partial q^2} \to \frac{\dfrac{\Delta\Psi(q_{j+1})}{\Delta q} - \dfrac{\Delta\Psi(q_j)}{\Delta q}}{\Delta q}$$

$$\to \frac{\dfrac{c_{j+1}(t) - c_j(t)}{\Delta q} - \dfrac{c_j(t) - c_{j-1}(t)}{\Delta q}}{\Delta q}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q) = -\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + U(q)\right]\Psi(q)$$

# 微分を差分で書くと




$$\frac{\partial\Psi(q_j)}{\partial q} \to \frac{c_j(t) - c_{j-1}(t)}{\Delta q}$$

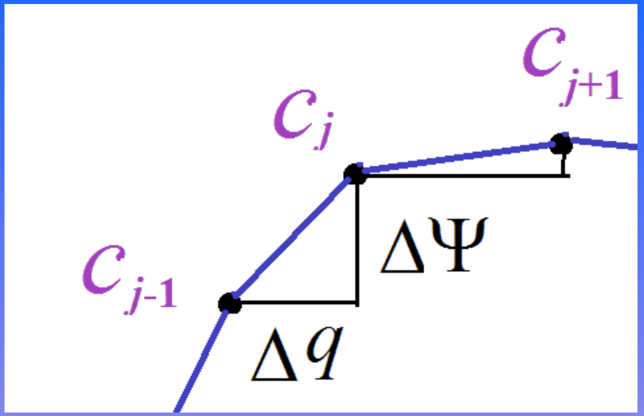
$$\frac{\partial^2\Psi(q_j)}{\partial q^2} \to \frac{c_{j+1}(t) - 2c_j(t) + c_{j-1}(t)}{\Delta q^2}$$

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(q_j)}{\partial q^2} \to -\varepsilon c_{j+1}(t) + 2\varepsilon c_j(t) - \varepsilon c_{j-1}(t)$$

$\varepsilon = \hbar^2 / 2m\Delta q^2$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q) = -\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + U(q)\right]\Psi(q)$$

# 微分を差分で書くと




$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(q_j)}{\partial q^2} \to -\varepsilon c_{j+1}(t) + 2\varepsilon c_j(t) - \varepsilon c_{j-1}(t)$$

$$\varepsilon = \hbar^2 / 2m\Delta q^2$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ \\ c_j(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{bmatrix} = -\frac{i}{\hbar}\begin{bmatrix} 2\varepsilon + U(q^1) & -\varepsilon & 0 & \cdots & & 0 \\ -\varepsilon & 2\varepsilon + U(q^2) & -\varepsilon & 0 & \ddots & \\ 0 & -\varepsilon & 2\varepsilon + U(q^3) & -\varepsilon & \ddots & \\ \vdots & 0 & -\varepsilon & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & \ddots & & \\ & & & & & \\ 0 & \cdots & & & & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ \\ c_j(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\boldsymbol{\Psi}(t)$$

ハミルトニアンは
エルミート共役

**メッシュ** $N \to \infty$ **(** $\Delta q \to$ 小さい **):ヒルベルト空間**

# ハミルトニアンの対角化とユニタリー変換

**固有方程式**

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\psi}_n = E_n\boldsymbol{\psi}_n$$

**固有値は実**

**ハミルトニアンはエルミート共役**

$$\boldsymbol{\psi}_n{}^T\boldsymbol{\psi}_m = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

**固有ベクトルの規格直交性**

## ユニタリー行列は、固有ベクトルを並べて作る

**大きさは規格化**

$$1 = \sum_{n=1}^{N} \left| c_n^j \right|^2$$

$$\boldsymbol{\psi}_n = \begin{array}{cccccc} E_1 & & E_2 & & E_3 & \cdots \\ \begin{bmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \\ \vdots \\ c_{j-1}^1 \\ c_j^1 \\ c_{j+1}^1 \\ \vdots \\ c_n^1 \end{bmatrix} & , & \begin{bmatrix} c_1^2 \\ c_2^2 \\ \vdots \\ c_{j-1}^2 \\ c_j^2 \\ c_{j+1}^2 \\ \vdots \\ c_n^2 \end{bmatrix} & , & \begin{bmatrix} c_1^3 \\ c_2^3 \\ \vdots \\ c_{j-1}^3 \\ c_j^3 \\ c_{j+1}^3 \\ \vdots \\ c_n^3 \end{bmatrix} & \cdots \end{array}$$

# ユニタリー行列

## 列は座標、行はエネルギー固有値の並び

**ユニタリー行列**

$$
\begin{array}{c c}
\begin{array}{cccccccc} E_1 & E_2 & \cdots & \cdots & E_k & \cdots & E_N \end{array} & \\
\mathbf{U} = \begin{bmatrix}
c_1^1 & c_1^2 & c_1^3 & \cdots\cdots & c_1^k & \cdots\cdots & c_1^N \\
c_2^1 & c_2^2 & c_2^3 & \cdots\cdots & c_2^k & \cdots\cdots & c_2^N \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\
c_{j-1}^1 & c_{j-1}^2 & c_{j-1}^3 & \cdots\cdots & c_{j-1}^k & \cdots\cdots & c_{j-1}^N \\
c_j^1 & c_j^2 & c_j^3 & \cdots\cdots & c_j^k & \cdots\cdots & c_j^N \\
c_{j+1}^1 & c_{j+1}^2 & c_{j+1}^3 & \cdots\cdots & c_{j+1}^k & \cdots\cdots & c_{j+1}^N \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\
c_N^1 & c_N^2 & c_N^3 & \cdots\cdots & c_N^k & \cdots\cdots & c_N^N
\end{bmatrix}
&
\begin{array}{c} q^1 \\ q^2 \\ \vdots \\ q^{j-1} \\ q^j \\ q^{j+1} \\ \vdots \\ q^N \end{array}
\end{array}
$$

**その共役複素転置行列**

$$
\begin{array}{c c}
\begin{array}{ccccccc} q^1 & q^2 & q^3 & \cdots & q^j & \cdots & q^N \end{array} & \\
\mathbf{U}^\dagger = \begin{bmatrix}
c_1^{1\dagger} & c_2^{1\dagger} & c_3^{1\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{1\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{1\dagger} \\
c_1^{2\dagger} & c_2^{2\dagger} & c_3^{2\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{2\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{2\dagger} \\
c_1^{3\dagger} & c_2^{3\dagger} & c_3^{3\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{3\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{3\dagger} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & & \cdots\cdots & \vdots \\
c_1^{k\dagger} & c_2^{k\dagger} & c_3^{k\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{k\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{k\dagger} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & c_j^{k+1\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{k+1\dagger} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\
c_1^{N\dagger} & c_2^{N\dagger} & c_3^{N\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{N\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{N\dagger}
\end{bmatrix}
&
\begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ \\ E_k \\ E_{k+1} \\ \vdots \\ E_N \end{array}
\end{array}
$$

座標空間とエネルギー空間の間の変換と考えることもできる。

# ユニタリー行列

２つを掛け合わせると

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}=\begin{bmatrix} c_1^{1\dagger} & c_2^{1\dagger} & c_3^{1\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{1\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{1\dagger} \\ c_1^{2\dagger} & c_2^{2\dagger} & c_3^{2\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{2\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{2\dagger} \\ c_1^{3\dagger} & c_2^{3\dagger} & c_3^{3\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{3\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{3\dagger} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & & \cdots\cdots & \vdots \\ c_1^{k\dagger} & c_2^{k\dagger} & c_3^{k\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{k\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{k\dagger} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & c_j^{k+1\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{k+1\dagger} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\ c_1^{N\dagger} & c_2^{N\dagger} & c_3^{N\dagger} & \cdots\cdots & c_j^{N\dagger} & \cdots\cdots & c_N^{N\dagger} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1^1 & c_1^2 & c_1^3 & \cdots\cdots & c_1^k & \cdots\cdots & c_1^N \\ c_2^1 & c_2^2 & c_2^3 & \cdots\cdots & c_2^k & \cdots\cdots & c_2^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\ c_{j-1}^1 & c_{j-1}^2 & c_{j-1}^3 & \cdots\cdots & c_{j-1}^k & \cdots\cdots & c_{j-1}^N \\ c_j^1 & c_j^2 & c_j^3 & \cdots\cdots & c_j^k & \cdots\cdots & c_j^N \\ c_{j+1}^1 & c_{j+1}^2 & c_{j+1}^3 & \cdots\cdots & c_{j+1}^k & \cdots\cdots & c_{j+1}^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots & \vdots \\ c_N^1 & c_N^2 & c_N^3 & \cdots\cdots & c_N^k & \cdots\cdots & c_N^N \end{bmatrix}$$

# ユニタリー行列

単位行列になる。（固有ベクトルの直交性から）

$$
\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & \cdots\cdots 0 & \cdots\cdots 0 \\
0 & 1 & 0 & \cdots\cdots 0 & \cdots\cdots 0 \\
0 & 0 & 1 & \cdots\cdots 0 & \cdots\cdots 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots\cdots 1 & \cdots\cdots 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots 0 & \cdots\cdots 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots\cdots \vdots & \cdots\cdots \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots\cdots 0 & \cdots\cdots 1
\end{bmatrix}
$$

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1}$$

共役複素転置行列が
逆行列になっている。

# ユニタリー変換とハミルトニアンの対角化

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\Psi} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\mathbf{\Psi}$$

**ハミルトニアンは**
**エルミート共役**

$$\mathbf{H} = \begin{array}{c@{}c}
\begin{array}{ccccccc} q^1 & q^2 & \cdots & q^j & q^{j+1} & \cdots & \\ \end{array} & \\
\left[\begin{array}{ccccccc}
U(q^1)+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & \cdots & & & 0 \\
-\varepsilon & U(q^2)+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & \ddots & & \\
0 & -\varepsilon & U(q^3)+2\varepsilon & -\varepsilon & \ddots & & \\
\vdots & 0 & -\varepsilon & \ddots & \ddots & & \\
 & & 0 & \ddots & & & \\
 & & & & & & \\
 & & & & & & \\
0 & \cdots & & & & 0 & 
\end{array}\right] &
\begin{array}{c} q^1 \\ q^2 \\ \vdots \\ \vdots \\ q^j \\ q^{j+1} \\ \vdots \\ q^n \end{array}
\end{array}$$

$$\mathbf{\Psi} = \begin{array}{c@{}c}
\left[\begin{array}{c} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{j-1} \\ c_j \\ c_{j+1} \\ \vdots \\ c_N \end{array}\right] &
\begin{array}{c} q^1 \\ q^2 \\ \vdots \\ q^{j-1} \\ q^j \\ q^{j+1} \\ \vdots \\ q^N \end{array}
\end{array}$$

# ユニタリー行列と行列の対角化

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U\Psi} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{UH\Psi}$$

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \mathbf{I}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U\Psi} = -\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{UHU}^{\dagger}\right)\mathbf{U\Psi}$$

$$\mathbf{H}' = \mathbf{UHU}^{\dagger}$$

$$\mathbf{UHU}^{\dagger} = \mathbf{U}\begin{bmatrix} U(q^1)+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & \cdots & & 0 \\ -\varepsilon & U(q^2)+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & \ddots & \\ 0 & -\varepsilon & U(q^3)+2\varepsilon & -\varepsilon & \ddots & \\ \vdots & 0 & -\varepsilon & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & \ddots & & \\ & & & & & \\ 0 & \cdots & & & 0 & \end{bmatrix}\mathbf{U}^{\dagger}$$

# ユニタリー行列と行列の対角化

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U}\mathbf{\Psi} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}'\mathbf{U}\mathbf{\Psi}$$

$$\mathbf{H}' = \mathbf{U}\mathbf{H}\mathbf{U}^{\dagger}$$

$$\mathbf{\Psi} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{j-1} \\ c_j \\ c_{j+1} \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} & \begin{array}{c} q^1 \\ q^2 \\ \vdots \\ q^{j-1} \\ q^j \\ q^{j+1} \\ \vdots \\ q^N \end{array} \end{array}$$

$$\mathbf{H}' = \begin{array}{cc} \begin{array}{ccccccc} E_1 & E_2 & \cdots & \cdots & E_j & \cdots & E_N \end{array} & \\ \begin{bmatrix} E_1 & 0 & 0 & \cdots & & & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 & \ddots & & \\ 0 & 0 & E_3 & 0 & \ddots & & \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots & \ddots & & \\ & & 0 & \ddots & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ 0 & \cdots & & & & 0 & \end{bmatrix} & \begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ \vdots \\ E_j \\ \vdots \\ \vdots \\ E_N \end{array} \end{array}$$

# ユニタリー行列と行列の対角化

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}'\boldsymbol{\psi} \qquad \boldsymbol{\psi} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Psi}$$

$$\boldsymbol{\Psi} = \sum_n c_n^0 \boldsymbol{\psi}_n$$

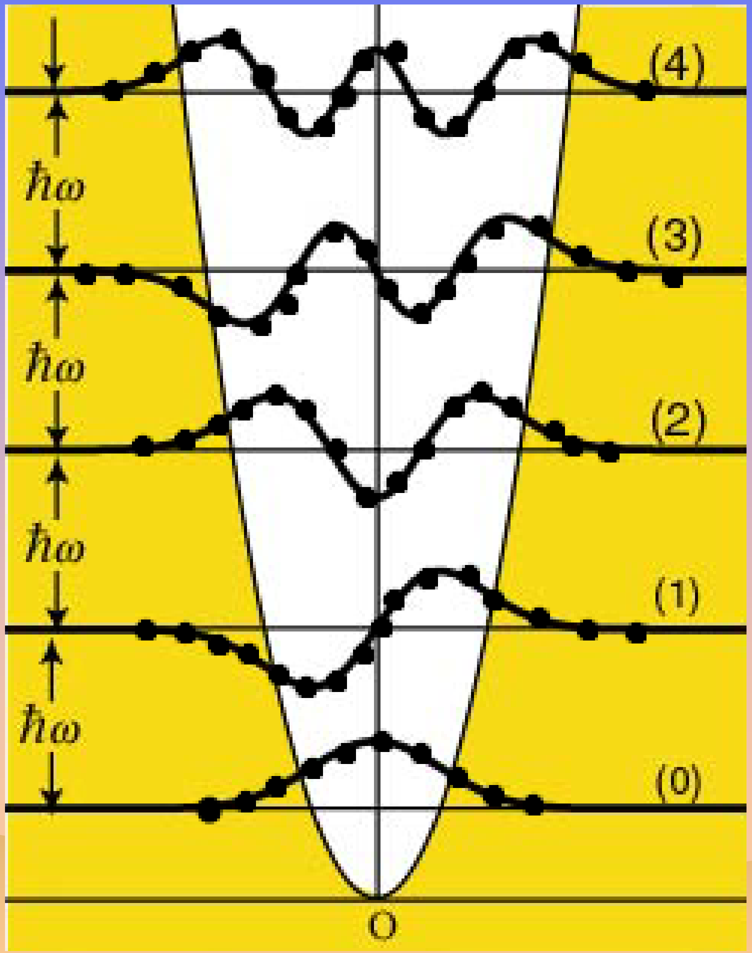
$$\mathbf{H}' = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} E_1 & E_2 & \cdots & \cdots & E_j & \cdots & E_N \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccc} E_1 & 0 & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 & \ddots & \\ 0 & 0 & E_3 & 0 & \ddots & \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & \ddots & & \\ & & & & & \\ 0 & \cdots & & & 0 & \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ \vdots \\ E_j \\ \vdots \\ \vdots \\ E_N \end{array}$$

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \begin{array}{c} E_1 \\ \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ \\ \vdots \\ E_j \\ \vdots \\ \vdots \\ E_N \end{array}, \quad \boldsymbol{\psi}_2 = \begin{array}{c} E_2 \\ \left[\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ \\ \vdots \\ E_j \\ \vdots \\ \vdots \\ E_N \end{array}, \cdots$$

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \left[\begin{array}{c} c_1^1 \\ c_2^1 \\ \vdots \\ c_{j-1}^1 \\ c_j^1 \\ c_{j+1}^1 \\ \vdots \\ c_n^1 \end{array}\right], \quad \boldsymbol{\psi}_2 = \left[\begin{array}{c} c_1^2 \\ c_2^2 \\ \vdots \\ c_{j-1}^2 \\ c_j^2 \\ c_{j+1}^2 \\ \vdots \\ c_n^2 \end{array}\right], \cdots$$

# 固有値を縦軸、固有ベクトルを横軸にプロットすると

調和振動子



# 固有値、固有ベクトルが求まると

**静的なベクトル展開**

$$\mathbf{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \rightarrow \quad \Psi = \sum_n c_n^0 \psi_n$$

**時間依存する場合**

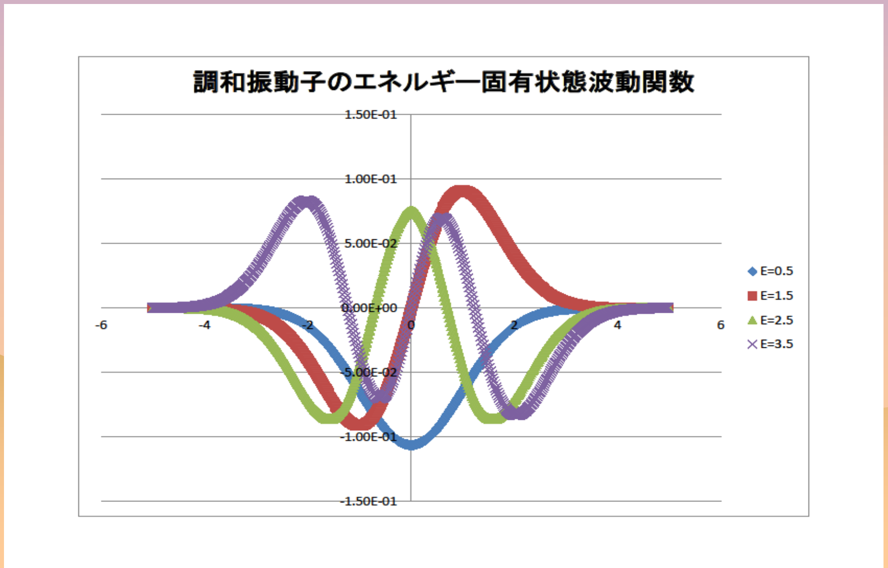
$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_n = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\psi_n = -\frac{i}{\hbar}E_n\psi_n \quad \rightarrow \quad \Psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n$$

$$c_n(t) = \mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar} c_n^0$$

**各固有ベクトルは**
**それぞれ同じ時間依存性**

↓

**同じ時間依存性を持つ**
**成分で分解**

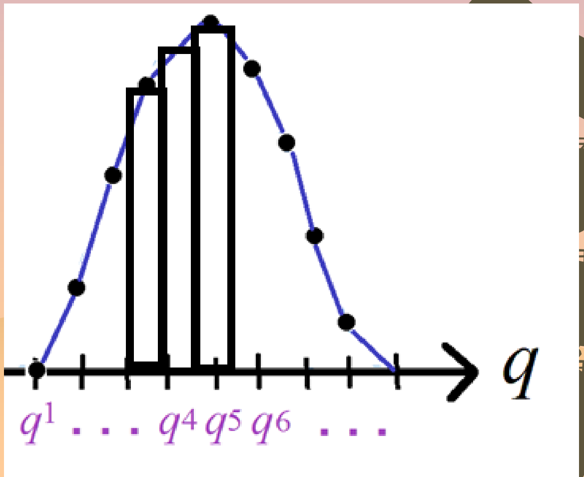


# ベクトルの内積と積分

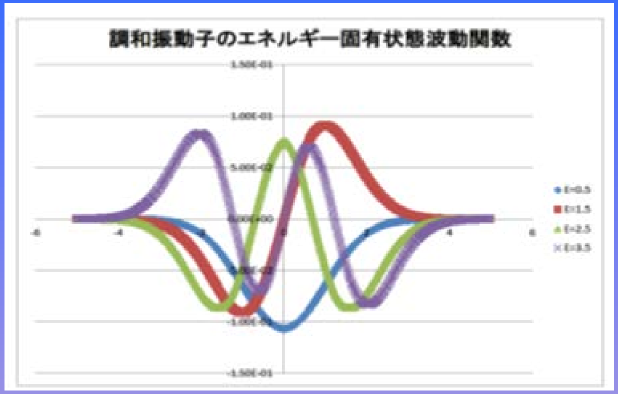
$$\mathbf{\Psi}^{t}(t)\mathbf{\Psi}(t)=\begin{bmatrix} c_1^{\dagger}(t) & c_2^{\dagger}(t) & \cdots & c_{j-1}^{\dagger}(t) & & \cdots & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_{j-1}(t) \\ c_j(t) \\ c_{j+1}(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{bmatrix}=\sum_j \left|c_j(t)\right|^2$$

$$I=\mathbf{\Psi}^{t}(t)\mathbf{\Psi}(t)\Delta q$$

$$I=\int dq\Psi(q)\Psi^{\dagger}(q)=\int dq\left|\Psi(q)\right|^2$$



# 固有関数系の直交性




**固有ベクトル**　　　**固有関数**

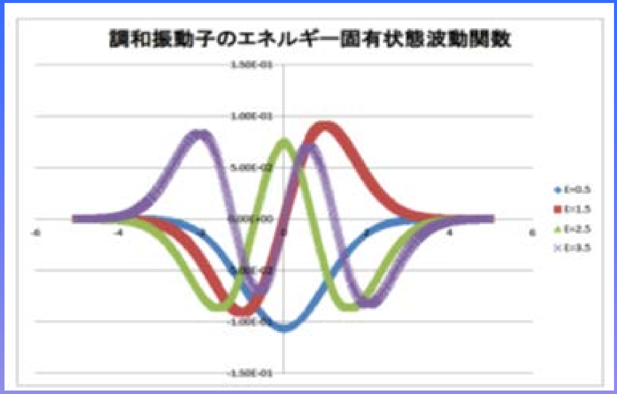
$$\Psi_n \rightarrow \psi_n(q)$$

**この固有関数は調和振動子に対するシュレディンガー方程式に対し**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+\frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right]\psi_n(q)=E_n\psi_n(q) \qquad (n=1,2\cdots)$$

**の関係を満足している。**

# 固有関数系の直交性




固有ベクトル　　　固有関数

$$\boldsymbol{\Psi}_n \rightarrow \psi_n(q)$$

**ベクトルの規格直交性**

**関数の規格直交性**

$$\boldsymbol{\Psi}_n{}^T \boldsymbol{\Psi}_m = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \rightarrow \int dq\, \psi_n^\dagger(q) \psi_m(q) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

例：三角関数 $\int_{-\pi}^{\pi} \sin(\mathrm{m}\,t)\sin(\mathrm{n}\,t)dt = \begin{cases} \pi & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$

**固有（直交）ベクトルによる展開**

$$\boldsymbol{\Psi}(t) = \sum_n c_n(t) \boldsymbol{\Psi}_n$$

**固有（直交）関数による展開**

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(q)$$

フーリエ展開もこのその一種

# 特殊関数

任意の関数は直交関数系で展開できる。

異なる微分方程式型に、異なる直交関数系が導入される（エルミート、ルジャンドル、ベッセル関数等）

**調和関数系の場合はエルミート関数（青色の部分）**

$$\psi_1(q) \propto \mathrm{e}^{-q^2}$$

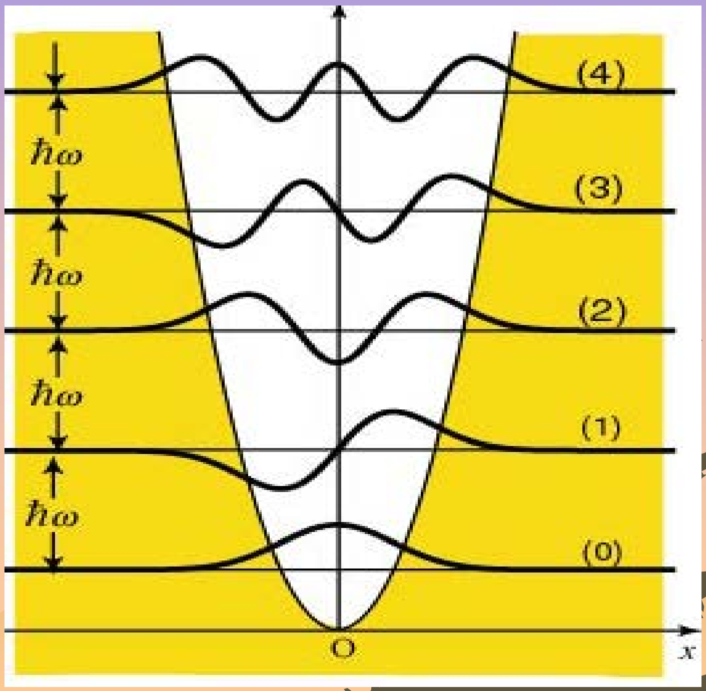
$$\psi_2(q) \propto q\,\mathrm{e}^{-q^2}$$

$$\psi_3(q) \propto \left(8q^3 - 12q\right)\mathrm{e}^{-q^2}$$

$$\psi_4(q) \propto \left(16q^4 - 48q^2 + 12\right)\mathrm{e}^{-q^2}$$

**エルミート関数** $H_n(q) \equiv (-1)^n \mathrm{e}^{q^2} \dfrac{d^n}{dq^n} \mathrm{e}^{-q^2}$

**エネルギーが飛び飛びで波の性質**



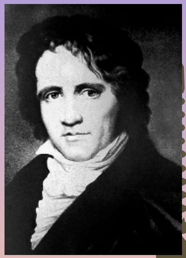
# Special functions

- Harmonic case: Hermit function

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial q^2} - 2q\frac{\partial}{\partial q} + 2n\right]H_n(q) = 0 \quad (n = 1, 2\cdots)$$

- Cylindrical case: Bessel function

$$\left[q^2\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q\frac{\partial}{\partial q} + (q^2 - n^2)\right]J_n(q) = 0$$



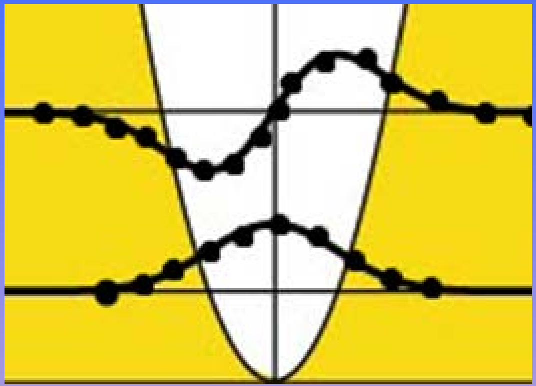
- Legendre Polynomial ($\rightarrow Y_l^m(\theta, \varphi)$)

$$\frac{\partial}{\partial q}\left[(1 - q^2)\frac{\partial}{\partial q} + n(n+1)\right]P_n(q) = 0$$

# レポート

調和振動子の基底と最低励起状態を考える。
2状態は摂動Δで結びついている。
このハミルトニアンは

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \omega_1 & \Delta \\ \Delta & \omega_2 \end{bmatrix}$$



① このハミルトニアンの固有値を求めよ。
② このハミルトニアンの固有ベクトルを求めよ。
（大きさは規格化すること）
③ 求まった2つ固有ベクトルの内積を求め、直交性を確かめよ。
④ 求まった固有ベクトルよりユニタリー行列Uを構成せよ。
⑤ ユニタリー行列Uの共役複素転置行列$U^*$を書き下せ。
⑥ $U^* U$が単位行列になることを確かめよ。
⑦ $H' = U^* H U$が対角行列になっていることを確かめよ。