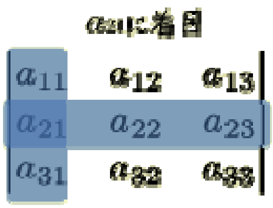
量子力学入門　第七回　参考資料—1　**行列式の展開**　　小山　裕

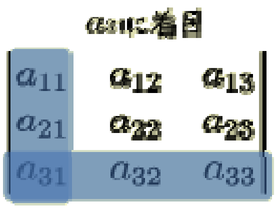
2 次の行列式ならすぐに求めることができますが，3 次以上の場合には簡単にできません．そこで，3 次以上の行列式を 2 次以下に展開する方法があります．それは**小行列式展開**と呼ばれる方法です．たとえば，つぎのように展開できます．

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{21}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{31}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}$$

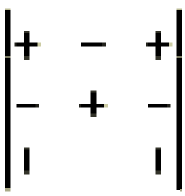
これは第 1 列について展開していますが，じっくり見ると規則性があることに気付きます．
係数について見てみます．まずは $a_{11}$ についてです．


右辺第 1 項の係数には $a_{11}$ が出てきてます．そしてそれに付随する小行列式は $a_{11}$ が含まれている。1 行目（横の並び）と 1 列目（縦の並び）が取り除かれた形になっています．$a_{21}, a_{31}$ についても同様のことがいえます．




符号について見てみます．第 1 行 1 列（左上）をプラス，そこから下または右に 1 つ進むと符号が反転すると決められています．例えば $a_{11}$ は左上にあるのでプラス，$a_{21}$ は 1 つ下に行くのでマイナス，$a_{31}$ は 2 つ下に行くのでプラスになります．つまり



係数と符号は第 1 列以外で展開しても全く同じです．たとえば第 2 行で展開すれば

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = -a_{21}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{22}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{23}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}$$ となります．

量子力学入門　第七回　参考資料―2　小山　裕

３次元の無限大箱型ポテンシャルの中に閉じ込められた電子のシュレジンガー方程式（量子箱）-変数分離法の例題-

前回は一次元の話でしたが、これはちょっと拡張するだけで、二次元、三次元的な量子井戸に閉じ込められた電子の固有値・固有関数を求める問題に拡張できます。
箱の中のポテンシャルエネルギーがゼロで、その周りのポテンシャルが無限大∞であるとき、箱の中の電子に対するシュレジンガーの波動方程式を立てて、変数分離型の波動関数を求める。
シュレジンガー波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$ である。

ここで、
$\psi(x,y,z)\equiv X(x)\times Y(y)\times Z(z)$　と仮定する（変数分離型の波動関数を求める）と、

$$\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}Y(y)Z(z)+\frac{\partial^2 Y(x)}{\partial y^2}X(x)Z(z)+\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}X(x)Y(y)=-\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)^2 X(x)Y(y)Z(z)$$

が得られます。これを、両辺を $X(x)Y(y)Z(z)$ で割って変形すると、

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(x)}{\partial y^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}=-\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)^2$$

が得られますが、これはそれぞれｘだけ、ｙだけ、ｚだけの項の足し算が、いつも定数（右辺）になるので、それぞれの項が定数であると成り立ちます、しかも右辺はいつも負の量なので、どれかが大きなマイナスでどれかが小さなプラスということも考えられますが、一応、それぞれの項がマイナスの定数であれば一般にこの式がいつも成り立ちますから、

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}=-\alpha^2$$
$$\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}=-\beta^2$$
$$\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}=-\gamma^2$$

などという、解きやすい形の微分方程式が求められます。

これらは、一次元の無限量子井戸ポテンシャル問題と同じ形の解を持つことになり、固有値（固有エネルギー）は

$$E_{n.l.s}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{l^2}{b^2}+\frac{s^2}{c^2}\right)\quad (n.l.s=1,2,3,\cdots)$$

であり、固有関数は

$\Psi_{n,l,s}=X_n(x)\times Y_l(y)\times Z_s(z)$ で与えられます。ここで $(n.l.s=1,2,3,\cdots)$ は量子数です。