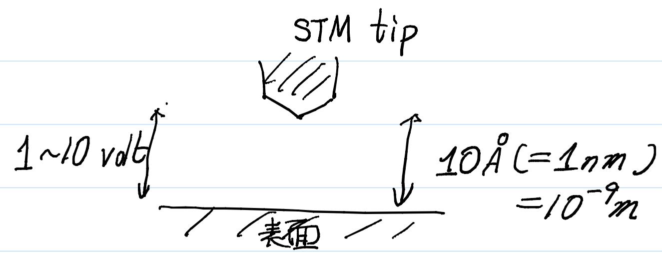
物性研究のための量子力学 入門

量子力学 ↔ 古典力学　　ミクロの世界の基本方程式

不確定性原理（位置と運動量の両方を精密に決定するのには限界がある）

$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar = 4.1 \times 10^{-15}\ \mathrm{eV \cdot s}$　プランク定数　　$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$

〈どんな意味があるのか？〉



量子の世界（電子）

エネルギー　1 電子ボルト $= 1\ \mathrm{eV}$

時間　1 フェムト秒 $= 10^{-15}\ \mathrm{s}$

エネルギー・時間 $= 10^{-15}\ \mathrm{eV \cdot s}$　≃ プランク定数

長さ $\fallingdotseq 1\text{Å} = 10^{-9}\ \mathrm{m}$

速度 $\fallingdotseq \dfrac{10^{-9}\ \mathrm{m}}{10^{-15}\ \mathrm{s}} = 10^{6}\ \mathrm{m/s}$（光速の $\frac{1}{100}$）

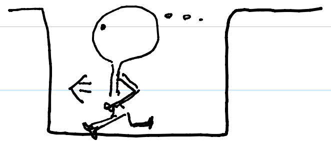
質量 $= 9.1 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$

↳ $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2}\, 9.1 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}\ 10^{12}\ \mathrm{m^2/s^2} = \frac{1}{2} \dfrac{9.1 \times 10^{-31} \times 10^{12}}{1.6 \times 10^{-19}} = 2.8\ \mathrm{eV}$

エネルギー×時間、位置×運動量 が同時に決まらない世界

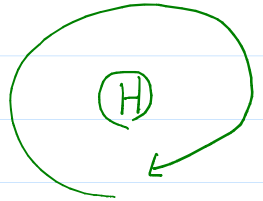
$\Delta E \cdot \Delta S \gtrsim \hbar$

すなわち

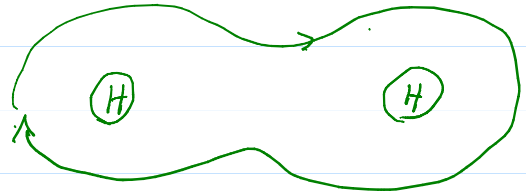


1Åの空間に閉じ込めようとすると
1電子ボルトの運動エネルギーで動き出す。

例えば



水素原子



水素分子

閉じ込めが弱い分だけ
低い運動エネルギーを持つ ⇒ 化学結合の一因。

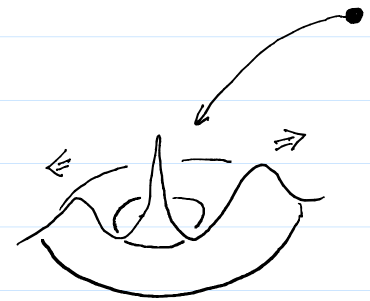
[もっとも、もしも不確定性原理がなければ
陽子と電子は一点に集まってクーロン
エネルギーを得することができる。]

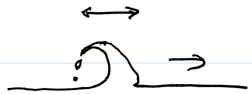
電子の波動性

波動関数 $\psi(x)$ により（確率）分布が記述される。

「波動」と同様に群速度が　電子の速度に対応する。

"古典的波動





古典的波動についてまず考えてみる　（波も位置と運動量⇔波数を完全に決めることはできない）

$$\alpha(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,A(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}$$

k：波数

ω：振動数（$\omega(k)$：分散関係）

フーリエ表現（重ね合わせ）

- $A(k)$ が $k=k_0$ で特に大きい $\Rightarrow e^{ik_0x-i\omega(k_0)t}$　空間的に広がった波、一様に速さ $\frac{\omega(k_0)}{k_0}$ で伝わる。
- $A(k)$ が k によらない $\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx-i\omega(k)t}dk$　空間的に局在した波。

- plot
- ListAnimate
- Plot3D
- ContourPlot

☆ もしも $A(k)=e^{-ak^2}$ かつ $\omega(k)=bk$　だとすると　$\alpha(x,t)=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\,e^{-\frac{(x-bt)^2}{4a}}$

$x=bt\pm2\sqrt{a}$ に局在。速度 b で進行する波　（$b=\left.\frac{d\omega(k)}{dk}\right|_{k=0}$）

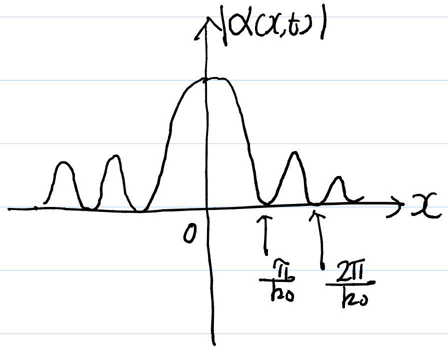
⇒波束　　　　群速度

t=0 での波の形

① $A(k)$ 

とする

$$\alpha(x,t)=\int_{-k_0}^{k_0} dk\, A_0\, e^{ikx} = A_0\, 2k_0 \frac{\sin(k_0 x)}{k_0 x}$$



波は $x≒0$ の周りに局在する。

$A(k)$が狭いと α は広がる。 波数を fix すると空間的に広がる

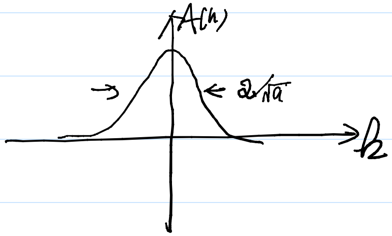
$A(k)$が広いと α はより局在。 波数を定めないと 〃 局在する

古典波は不確定性を持つ $\Delta k\, \Delta x ≒ \mathrm{const.}$

② $A(k)=A_0 e^{-ak^2}$

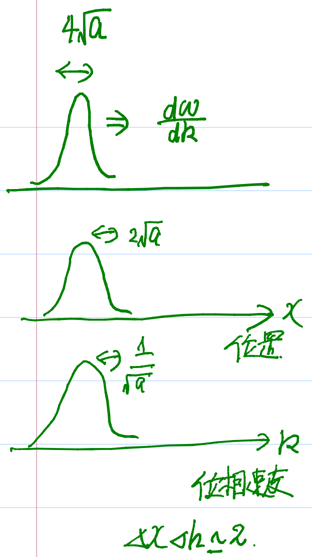
$$\alpha(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, A_0\, e^{ikx-ak^2}$$

$$= A_0 \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{-\frac{x^2}{4a}} \qquad \Delta x \simeq 2\sqrt{a}$$



aが大きいと(Aが狭いと)空間的に広がる。

aが小さいと(Aが広いと) 〃 局在する。



物質波も古典的な波動と同様に位置と波数が同時に決まらない。
しかし両者は同じものではない。

シュレディンガー方程式 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$ (自由空間の場合)

波動方程式 $-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$ → $+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi$ を加えるとクライン・ゴルドン方程式

拡散方程式 $\frac{\partial}{\partial t}\psi = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$

・NDSolve (diffusion, wave, Schrödinger) (1D vs 2D)

量子力学

演算子と波動関数の導入

$p \leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

物質波 $p=\hbar k$ (光子のエネルギー $E=h\nu=\hbar\omega$)

・$-i\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx-i\omega t} = k e^{ikx-i\omega t}$

xに関する微分演算子 → 波数k → $\frac{p}{\hbar}$

・$i\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx-i\omega t} = \omega e^{ikx-i\omega t}$

tに関する微分演算子 → ω → エネルギー/$\hbar$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{E}\Psi$

↑

エネルギーに相当するもの

運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$

ポテンシャル〃 $V(x)$

ポテンシャル

固体中の電子は原子核や他の電子がおよぼすポテンシャルの作用のもと運動する。

ハミルトン演算子 (ハミルトニアン)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$$

※ポテンシャルは当該電子の運動によって影響される。

微分演算子による運動量の表現

$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$,　$[\hat{x}, \hat{p}] = -x \cdot i\hbar\frac{d}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}(x) = i\hbar$　運動量演算子 $\hat{p}$ と位置の演算子 $\hat{x}$

運動エネルギーは $\frac{1}{2m}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ となり，シュレディンガー方程式は $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\hat{p}^2\psi$ と書ける。

$= \hat{H}\psi$　H: ハミルトニアン

ポテンシャル $V(x)$ が存在するときは $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x)$ となる。

量子力学の確率解釈

電子を点 x に見い出す確率 $|\psi(x)|^2$ ⇒ 電子の位置の期待値 $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x' |\psi(x')|^2 dx'$

電子の運動量の期待値 $\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x') dx' = \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \frac{d^2}{dx'^2} \psi(x') dx'$

シュレディンガー方程式の特徴

- 複素関数である。
- 確率が保存する。(時間とともに変化しない) ↔ ノルムが減少する。

$$N(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$ ノルム (確率の総和)

$$\frac{dN(t)}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\dot{\psi}^*(x,t)\psi(x,t) + \psi^*(x,t)\dot{\psi}(x,t) \right) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*\right)\psi + \psi^* i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi \right] dx$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - \psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*\right)dx = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

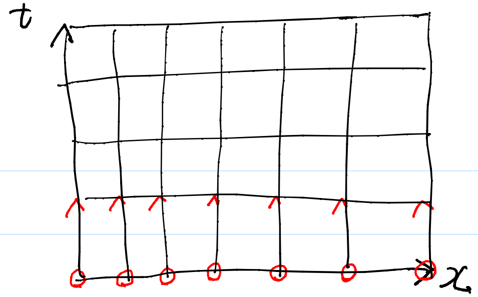
もしも無限で存在確率がゼロ

- 激しく振動する成分を持ちやすい (境界条件による)

どうやって解いているのか?

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$ 簡単化されたシュレディンガー方程式

空間をメッシュに区切る。(差分法)



$\psi(x_i, t_j)$ テーラー展開

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x_i, t_j) \simeq -i\,\frac{\psi(x_i, t_{j+1}) - \psi(x_i, t_j)}{t_{j+1} - t_j}$$

$$\simeq -i\,\frac{\psi(x_i, t_{j+1}) - \psi(x_i, t_{j-1})}{t_{j+1} - t_{j-1}}$$ より精度が高い。

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x_i, t_j) \simeq -\frac{1}{2}\,\frac{\psi(x_{i+1}, t_j) - 2\psi(x_i, t_j) + \psi(x_{i-1}, t_j)}{(x_{i+1} - x_{i-1})^2/4}$$

$\psi(x_{i'}, t_j)$, $\psi(x_{i''}, t_{j-1})$ と $\psi(x_i, t_{j+1})$ を関係づけることができる。

これを

$$\psi(x_i, t_{j+1}) = \sum_{i'} A_{ii'}\psi(x_{i'}, t_j) + \sum_{i''} B_{ii''}\psi(x_{i''}, t_{j-1}) \quad \text{—— (1)}$$

のように書き表わすことができる。

すなわち、現在と過去の情報から未来の情報を得ることができる。

- 空間をどれだけ細かく区切るか、
- 何次のテーラー展開を用いた式を使うか、
- 式(1)を用いて未来を求めるか、あるいは、推定値を用いて式を簡単化して求めるか（その場合、推定値の修正は何回まで行うか）

をmathematicaは自動的に判断する。手動で制御することも可。

拡張

シュレディンガー方程式　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi$　$V(x)$ ポテンシャル

波動方程式　$-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$　$+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi$ を加えると クライン・ゴルドン方程式

スピンゼロの相対論的粒子の従う方程式

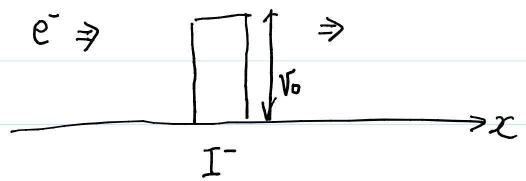
$\longleftrightarrow$ ディラック方程式

ポテンシャル

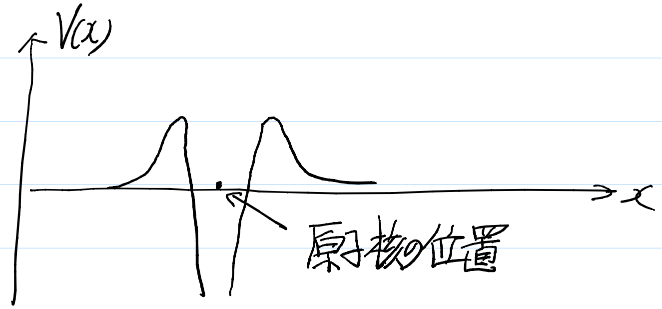
固体中の電子は原子核や他の電子がおよぼすポテンシャルの作用のもと運動する。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

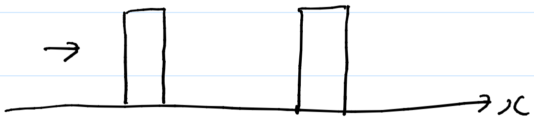
※ ポテンシャルは当該電子の運動によって影響される。



負の電荷を持つイオン（原子核＋内殻電子）をポテンシャル壁で近似的に表わす。



量子トンネリング　エネルギーが V_0 よりも小さな粒子でも ポテンシャル壁を とある小さな確率で
透過することができる。



共鳴トンネリング と 準束縛状態

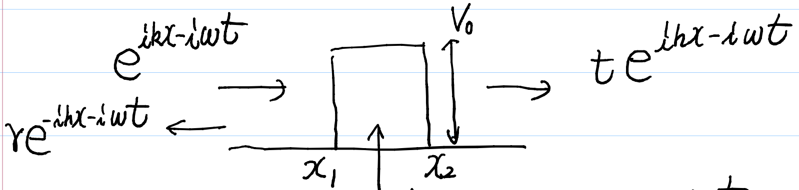
共鳴条件を満たせば、透過確率は特異的に大きくなる

外せば、　　　　　　　　　　　　　　小さくなる。

共鳴条件を外した2つのポテンシャル壁にはさまれた

電子は長時間壁の間にとどまる。

シュレディンガー方程式を解く。境界値問題



$$(Ae^{ikx}+Be^{-ikx})e^{-i\omega t}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}=\hbar\omega \\ \dfrac{\hbar^2(\kappa^2+V_0)}{2m}=\hbar\omega \end{cases}$$

(シュレディンガー方程式の)

波動関数は　左のような形を持つ。(区分的に解である)

微分まで連続に続けることができれば、それは求める波動関数である。

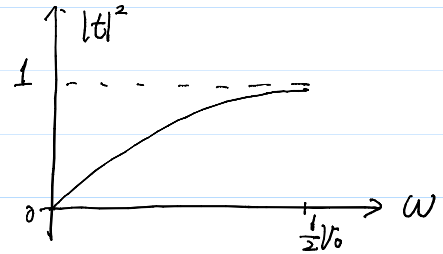
$$\begin{cases} e^{ikx_1}+re^{-ikx_1}=Ae^{\kappa x_1}+Be^{-\kappa x_1} \\ ik\,e^{ikx_1}-ikre^{-ikx_1}=A\kappa e^{\kappa x_1}-B\kappa e^{-\kappa x_1} \\ te^{ikx_2}=Ae^{\kappa x_2}+Be^{-\kappa x_2} \\ ikte^{ikx_2}=A\kappa e^{\kappa x_2}-B\kappa e^{-\kappa x_2} \end{cases}$$

$k=\sqrt{2\omega}$

$\kappa=\sqrt{V_0-2\omega}$

$$|t|^2=\frac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)\sinh^2((x_2-x_1)\kappa)+4k^2\kappa^2}$$

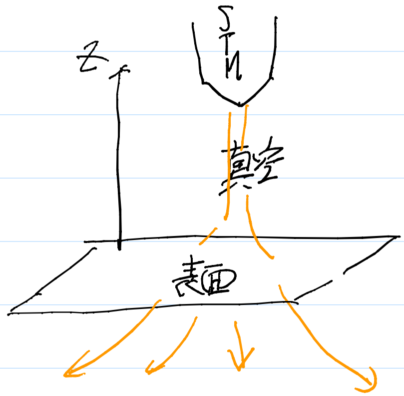
有限の値になる
トンネリング



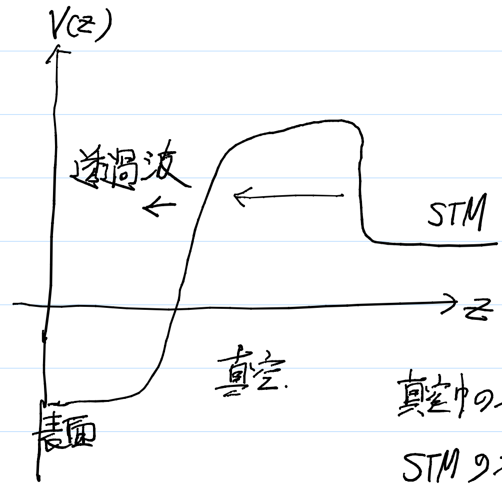
重ね合わせの原理 ⇒ 波束の透過・反射は 各kの透過・反射波を 重ねあわせればよい。

$$\psi_{\text{透過}}(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}dk\ A(k)\,t(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}$$

(古典波と同様)



透過波



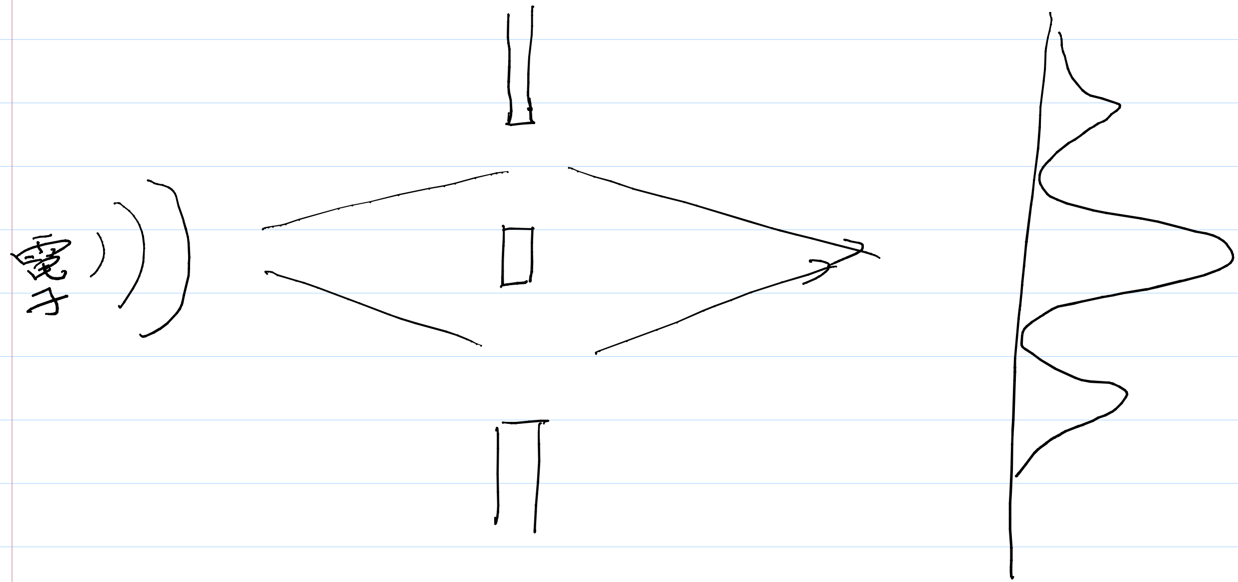
STMではこのトンネル電流を測定している。

真空中のポテンシャルは高い。

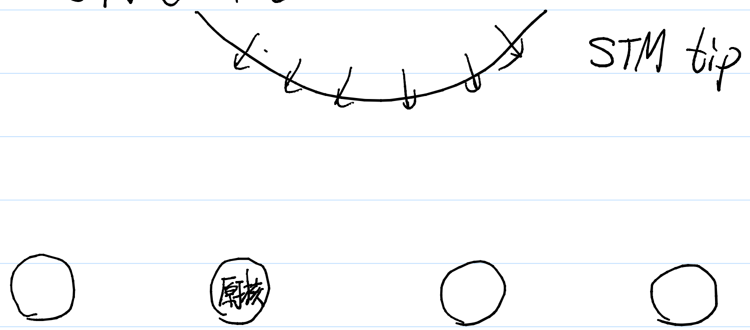
STMのポテンシャルは可変

ちょっと寄り道

マイケルソンモーリーの実験（電子の干渉）



表面原子系への応用（STM）



初期位置に依存した散乱の様子.

線型代数を用いて解く Schrödinger 方程式 $\longleftrightarrow$ NDSolve

○差分法とクランク・ニコルソン法

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi + V\psi$$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$ とかくとき、

$$i\hbar\frac{\psi(t+\Delta t)-\psi(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2}\left(H\psi(t+\Delta t)+H\psi(t)\right)$$

を用いて時間発展の方程式を解く方法をクランク・ニコルソン法という。

空間に関して2次元なのでこれを2段階に分けて適用する

$$\begin{cases} \frac{i\hbar}{\Delta t}\left(\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)-\psi(t,x,y)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\psi(t,x+\Delta x,y)-\psi(t,x,y)+\psi(t,x-\Delta x,y)\right)+\frac{V}{2}\psi(t,x,y) \\ \frac{i\hbar}{\Delta t}\left(\psi(t+\Delta t,x,y)-\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta y)^2}\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y+\Delta y)-\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)+\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y-\Delta y)+\frac{V}{2}\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y) \end{cases}$$

最初の式は

$$\frac{i\hbar}{\Delta t}\left(\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)-\psi(t,x,y)\right) = -\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\psi(t,x+\Delta x,y)-\psi(t,x,y)+\psi(t,x-\Delta x,y)\right)+\frac{V}{4}\psi(t,x,y)$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x+\Delta x,y)-\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)+\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x-\Delta x,y)\right)+\frac{V}{4}\psi(t+\frac{\Delta t}{2},x,y)$$

$-\frac{V}{4}$を対角成分に加える。

$$\begin{pmatrix} \frac{i\hbar}{\Delta t}-\frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & \frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & & \\ \frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(t+\frac{\Delta t}{2},0,y)\\ \psi(t+\frac{\Delta t}{2},\Delta x,y)\\ \vdots \\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\hbar}{\Delta t}+\frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & -\frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & & \\ -\frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^2} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(t,0,y)\\ \psi(t,\Delta x,y)\\ \vdots \\ \vdots\end{pmatrix}$$

$\frac{V}{4}$

すなわち　　$A\psi(t+\frac{\Delta t}{2}, x, y) = B\psi(t, x, y)$　を求めればよい。

これに対応する連立一次式のライブラリは mathematica が用意している。⇒ Linear Solve

次々にこれを行っていけば $t=T$ での波動関数を得ることができる。

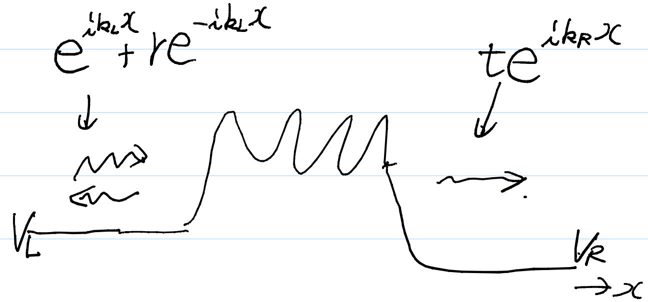
時間に依存しない Schrödinger 方程式を解く。

重ね合わせの原理を用いれば、各エネルギーに対する方程式をそれぞれ解けばよいことになる。

(ポテンシャルが時間に依存しないときに有効)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \Rightarrow E\psi = H\psi$$ を解く。

そのときの上記解法は mode matching method などとよばれる。



mode matching method　(1次元の場合)

$$E\psi_i + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\psi_{i+1}-\psi_i)-(\psi_i-\psi_{i-1})}{\Delta x^2} - V_i\psi_i$$　　ただし $\psi_i = \psi(x_i)$

エネルギー E (すなわち $k_L = \sqrt{\frac{2m(E-V_L)}{\hbar}}$ と $k_R = \frac{\sqrt{2m(E-V_R)}}{\hbar}$) を変えながら r と t を求める。

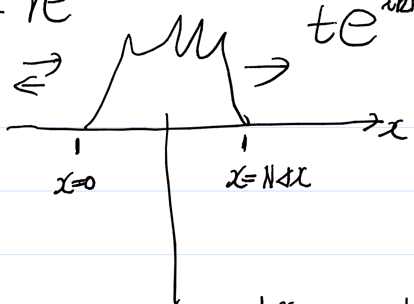
$|t(E)|^2$ がトンネル確率であり $\frac{k_R}{k_L}|t(E)|^2$ が電流に対応する。

課題1　mathematica プログラミング

mode matching 法を用いた透過確率の計算

$\psi(x) = e^{ik_L x} + r e^{-ik_L x}$ $\qquad \psi(x) = t e^{ik_R x}$ $\quad x \geqq N\Delta x.$

$x \leqq 0$



$A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$k = \sqrt{2m(E - V(x))/\hbar^2}$

$$x_i = -\Delta x \quad \begin{cases} \psi_{-1} = A e^{-ik\Delta x} + B e^{ik\Delta x} \\ \psi_0 = A + B \end{cases} \quad x_i = 0 \quad \Rightarrow \psi_{-1} = A e^{-ik\Delta x} + (\psi_0 - A) e^{ik\Delta x}$$

$$E\psi_0 + \frac{1}{2\Delta^2}(\psi_1 - 2\psi_0 + \psi_{-1}) - V_0\psi_0 = 0$$

$$\Downarrow$$

$$E\psi_0 + \frac{1}{2\Delta^2}(\psi_1 - 2\psi_0 + e^{ik\Delta x}\psi_0) - V_0\psi_0 = \frac{A}{2\Delta^2}(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x})$$

$$\Downarrow$$

$$\left(E - \frac{1}{\Delta^2} - V_0 + \frac{e^{ik\Delta}}{2\Delta^2}\right)\psi_0 + \frac{1}{2\Delta^2}\psi_1 = \frac{A}{2\Delta^2}(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x})$$

$$x_i = i\Delta x \qquad \left(E - \frac{1}{\Delta^2} - V_i\right)\psi_i + \frac{1}{2\Delta^2}\psi_{i+1} + \frac{1}{2\Delta^2}\psi_{i-1} = 0$$

$$x_i = (N+2)\Delta x \qquad \psi_{N+2} = T e^{ik_R(N+2)\Delta} = \psi_{N+1} e^{ik_R\Delta}$$ を用いて

$$E\psi_{N+1} + \frac{1}{2\Delta^2}(\psi_{N+1} e^{ik_R\Delta} - 2\psi_{N+1} + \psi_N) - V_{N+1}\psi_{N+1} = 0$$

よって

$$\left(E-\frac{1}{\Delta^2}+\frac{e^{ik_R\Delta}}{2\Delta^2}\right)\psi_{N+1}+\frac{1}{2\Delta^2}\psi_N=0$$

$$\begin{pmatrix} E-\frac{1}{\Delta^2}-V_0+\frac{e^{ik_L\Delta}}{2\Delta^2} & \frac{1}{2\Delta^2} & & \\ \frac{1}{2\Delta^2} & E-\frac{1}{\Delta^2}V_1 & \frac{1}{2\Delta^2} & \\ & \ddots & \ddots & \frac{1}{2\Delta^2} \\ & & \frac{1}{2\Delta^2} & E-\frac{1}{\Delta^2}+\frac{e^{ik_R\Delta}}{2\Delta^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_0\\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{N+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{e^+-e^-}{2\Delta^2}A\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$$

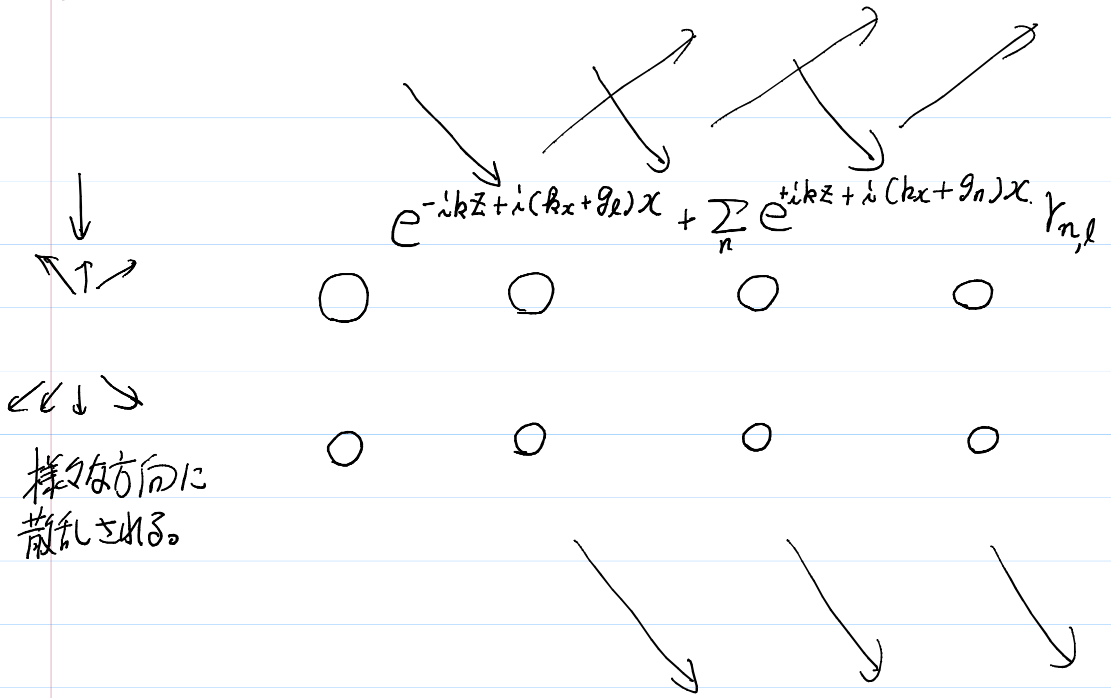
この連立一次方程式を解けばよい。 $t=\sqrt{\frac{k_R}{k_L}}\frac{\psi_{N+1}}{A}$, $T=\frac{k_R}{k_L}\left|\frac{\psi_{N+1}}{A}\right|^2$

課題2　mode matching を 2次元に拡張する。(宿題となってしまうか?)

課題3　サンプルプログラムを用いて おもしろい simulation を行う。例えばポテンシャルや初期波束を変えて解けるような問題を自作し自答する。

2次元の問題

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{k^2+(k_x+g_\ell)^2\right\}=E$$



$$e^{-ikz+i(k_x+g_\ell)x}+\sum_n e^{+ikz+i(k_x+g_n)x}\, r_{n,\ell}$$

r, tの行列化

様々な方向に
散乱される。

$$\sum_n e^{-ik_z z+i(k_x+g_n)}\, t_{n,\ell}$$

$$E\psi_{i n}=-\frac{1}{2\Delta^2}\left(\psi_{i+1,n}-2\psi_{i,n}+\psi_{i-1,n}\right)+\frac{1}{2}g_n^2\psi_{i,n}+\sum_m V_{i,\,n-m}\psi_{i,m}$$

すなわち

1Dの時の $E+\frac{1}{\Delta^2}-V_i \to$ 行列化

$$\to \left(E-\frac{1}{\Delta^2}-\frac{1}{2}g_n^2\right)\delta_{nm}-V_{i,\,n-m}$$

$z<0$ $V=0$, $\psi(z,x)=e^{ikz+i(k_x+g_\ell)x}+\sum_n e^{-ikz+i(k_x+g_n)x}\, r_n$

$$\psi_{-1,n}=e^{-ik\Delta}\delta_{\ell,n}+e^{ik\Delta}r_n=e^{-ik\Delta}\delta_{\ell,n}+e^{ik\Delta}\left(\psi_{0,n}-\delta_{\ell,n}\right)$$

$$\psi_{0,n}=\delta_{\ell,n}+r_n$$

同様にして

$E+\frac{1}{\Delta^2}-V_0-\frac{e^{ik\Delta}}{2\Delta^2}$

も行列化

$$E\psi_{0,n}=-\frac{1}{2\Delta^2}\left(\psi_{1,n}-2\psi_{0,n}+e^{ik\Delta}\psi_{0,n}\right)+\frac{1}{2}g_n^2\psi_{0,n}+\sum_m V_{0,\,n-m}\psi_{0,m}$$
$$-\left(e^{ik\Delta}-e^{-ik\Delta}\right)\delta_{\ell,n}$$

各要素が $\overset{(n\times n)}{\text{行列}}$ になる。それでもこの大きな行列を用意して
連立一次方程式を求めれば

$$
\begin{pmatrix}
E-\frac{1}{\Delta^2}-V_0+\frac{e^{ik_L\Delta}}{2\Delta^2} & \frac{1}{2\Delta^2} & & \\
\frac{1}{2\Delta^2} & E-\frac{1}{\Delta^2}V_1 & \frac{1}{2\Delta^2} & \\
 & \ddots & \ddots & \frac{1}{2\Delta^2} \\
 & & \frac{1}{2\Delta^2} & E-\frac{1}{\Delta^2}+\frac{e^{ik_R\Delta}}{2\Delta^2}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\psi_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{N+1}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\frac{e^+-e^-}{2\Delta^2}A \\ 0 \\ \vdots \\ 0
\end{pmatrix}
$$

$t_{n,l}$ が $n=1..n_{max}$
に対して求まる。これをすべての l に対して
くり返して行なえば t 行列が求まる。

$T = Tr(t^\dagger t)$ として求まる。