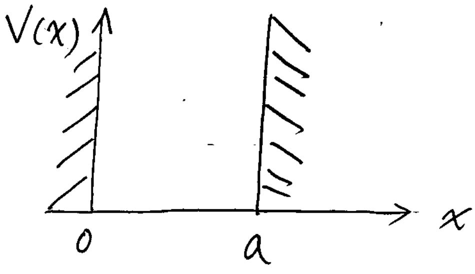
Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

8. 時間に依存しない摂動論

8.1. 摂動によるエネルギーのずれ（直感的な導出）

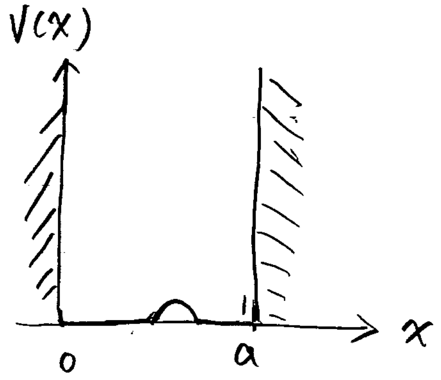


$H = H_0$

← このようなポテンシャルの固有値，固有関数は簡単に求められる。

$\phi_n, \quad E_n^{(0)}$

$H_0 \phi_n = E_n^{(0)} \phi_n$



$H = H_0 + \lambda V$

← このようなポテンシャルの固有状態，固有値を求めなければならないとする。 $H \psi_n = E_n \psi_n$

↓

固有波動関数は ϕ_n とあまり変わらないことが期待される。

$$H \psi_n = (H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n$$

で $\psi_n \sim \phi_n$ としてみる。

$$\rightarrow \quad (H_0 + \lambda V)\phi_n \approx E_n \phi_n$$

$$\downarrow \quad E_n = \underbrace{\langle \phi_n | H_0 | \phi_n \rangle}_{= E_n^{(0)}} + \underbrace{\langle \phi_n | \lambda V | \phi_n \rangle}_{= \Delta E_n}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

波動関数は

$$(H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n$$

より

$$(H_0 = E_n)\psi_n = -\lambda V \psi_n$$

これを形式的に解くと

$$\psi_n = \phi_n - \frac{1}{H_0 - E_n}\lambda V \psi_n$$

↑

H_0の固有状態

第２項で $E_n \sim E_n^{(0)}$, $\psi_n \sim \phi_n$ とおきかえると

$$\psi_n \sim \phi_n - \frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}}\lambda V \phi_n$$

$$= \phi_n - \sum_{n'} \frac{\langle \phi_{n'} | \lambda V | \phi_n \rangle}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \cdot \phi_{n'}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan.

8.2. 系統的な導出：１次の摂動論

$$H = H_0 + \lambda V$$

$$\boxed{(H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n}$$ を解きたい。

ただし $H_0 \phi_n = E_n^{(0)} \phi_n$ は解けているとする。

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots$$
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

と展開。

$\downarrow$

$$(H_0 + \lambda V)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \cdots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \cdots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \cdots)$$

- λ^0 のオーダー：

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \quad \rightarrow \quad \psi_n^{(0)} = \phi_n$$

※ $\psi_n = \underbrace{N(\lambda)}_{\text{規格化}} \left[\phi_n + \sum_{m\neq n} \underbrace{C_{nm}}_{\hookrightarrow\ \lambda C^{(1)}_{nm} + \lambda^2 C^{(2)}_{nm} + \cdots} \phi_m \right]$ と展開したことに相当

・λ^1 のオーダー（1次の摂動）

$$H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

(note) $\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \phi_m$ と展開できる。

（$m=n$ の項は波動関数 ψ の規格化を通じて考慮される。）

$$\downarrow$$

$$\sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} E_m^{(0)} \phi_m + V\phi_n = E_n^{(0)} \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \phi_m + E_n^{(1)} \phi_n$$

$\rightsquigarrow$

$\langle \phi_n | \rightarrow$ $$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle}$$

$\langle \phi_\ell | \rightarrow$ $(\ell \neq n)$

$$C_{n\ell}^{(1)} E_\ell^{(0)} + \langle \phi_\ell | V | \phi_n \rangle = E_n^{(0)} C_{n\ell}^{(1)}$$

$$\rightsquigarrow \boxed{C_{n\ell}^{(1)} = \frac{\langle \phi_\ell | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}}}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

8.2. 2次の摂動論

λ^2 のオーダー：

$$V\psi_n^{(1)} + H_0\psi_n^{(2)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}$$

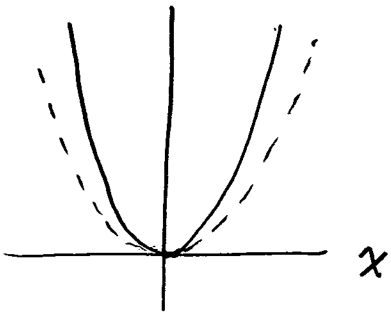
$\langle\phi_n| \rightarrow$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \langle\phi_n|V|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{l\neq n}\frac{\langle\phi_n|V|\phi_l\rangle\langle\phi_l|V|\phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}}$$

※ 2次の波動関数や高次の補正は
ちょっと大変
$\longrightarrow$ 別の近似法（変分法など）

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

例題： $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \beta x^4$



調和振動子の波動関数.

$$\Delta E_n = \langle n | \beta x^4 | n \rangle$$

$$x = \alpha_0 (a + a^\dagger) \qquad \alpha_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$x|n\rangle = \alpha_0 (\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle)$$
$$x^2|n\rangle = \alpha_0^2 (\sqrt{n}\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle + n|n\rangle + (n+1)|n\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,|n+2\rangle)$$

$$\downarrow$$

$$\langle n | x^4 | n \rangle = \alpha_0^4 \{ n(n-1) + (2n+1)^2 + (n+1)(n+2) \}$$
$$= \alpha_0^4 (6n^2 + 6n + 3)$$

$$\downarrow$$

$$E_n \sim (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega + \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (6n^2 + 6n + 3)$$

$2\hbar\omega$ —— $\qquad\qquad$ —— $2\hbar\omega + 36\varepsilon$

$\hbar\omega$ —— $\quad\Rightarrow\quad$ —— $\hbar\omega + 12\varepsilon$

0 —— $\qquad\qquad$ —— 0

非調和性.

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

8.3. 縮退がある場合の摂動論

$$C_{n\ell}^{(1)} = \frac{\langle \phi_\ell | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}} \qquad (n \neq \ell)$$

← $E_n^{(0)} = E_\ell^{(0)}$ （縮退がある）のときは発散

↝ 注意が必要.

H_0 の固有状態のうち $\phi_n^{(1)}, \phi_n^{(2)}, \dots, \phi_n^{(N)}$ がエネルギー $E_n^{(0)}$ に縮退しているとする。

$\phi_n^{(1)}, \cdots \phi_n^{(N)}$

※ 0次（非摂動）の解として, $\phi_n^{(1)}, \dots, \phi_n^{(N)}$ をとる必要性はない

∵ $\tilde{\phi}_n^{(i)} = \sum_{k=1}^{N} \alpha_{ki} \phi_n^{(k)}$ も H_0 の固有関数
（基底の組みなおし）

→ $\langle \tilde{\phi}_n^{(i)} | V | \tilde{\phi}_n^{(j)} \rangle = 0 \quad (i \neq j)$ という基底をとれば $C^{(1)}$ の発散を回避することができる。

↔ $\langle \tilde{\phi}_n^{(i)} | V | \tilde{\phi}_n^{(j)} \rangle = (\Delta E)_i \, \delta_{i,j}$ とすれば
エネルギーの1次の補正は $(\Delta E)_i$

↓ $\{ |\phi_n^{(1)}\rangle, \dots, |\phi_n^{(N)}\rangle \}$ で張られる限られた空間内で, V を対角化すればよい。

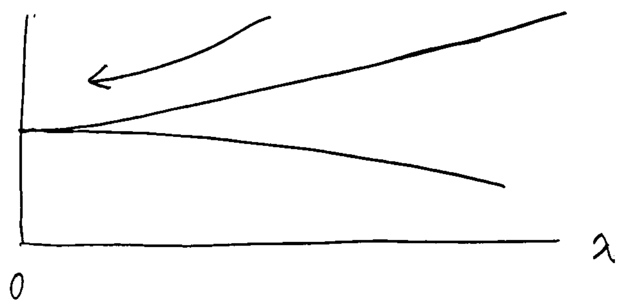
$$\tilde{\phi} \equiv \sum_k \beta_k \phi_n^{(k)}$$

$$\downarrow \quad V\tilde{\phi} = \Delta E \cdot \tilde{\phi}$$

$$\downarrow \quad \boxed{\sum_k \langle \phi_n^{(i)} | V | \phi_n^{(k)} \rangle \beta_k = \Delta E \cdot \beta_i}$$

→ この行列を対角化すれば ΔEが求まる

→ 摂動により縮退がとける



（λ→0 としたときになめらかにつながる状態を0次の解にとる）

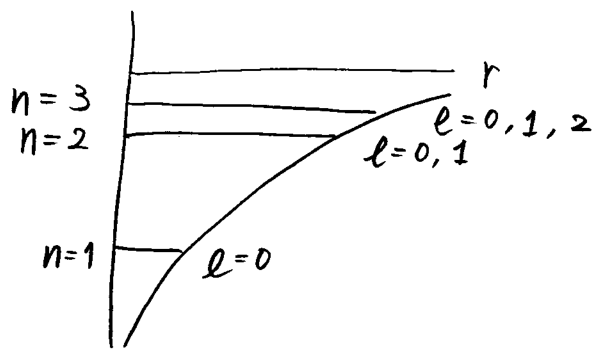
○ シュタルク効果

水素原子： $H = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2 \cdot \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

$n = 1, 2, \cdots$

$l = 0, 1, \cdots, n-1$



この水素原子に電場をかける（$\mathbb{E} = E\,\mathbb{e}_z$）

$$H \rightarrow H' = \underbrace{\frac{\mathbb{P}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}}_{= H_0} + \underbrace{eEz}_{= \lambda V}$$