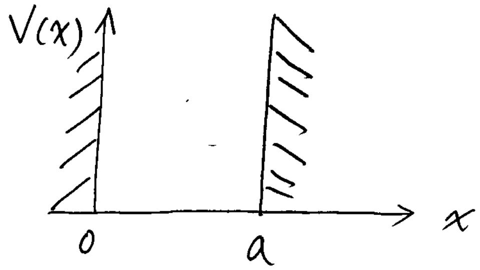
Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

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）

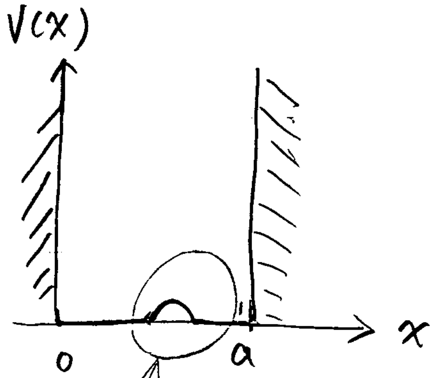


$H = H_0$

← 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。

ϕ_n, $E_n^{(0)}$

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



$H = H_0 + \lambda V$

補正

← 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

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

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

↑

$$\frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}} = \sum_{n'} |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \times \frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}}$$

$$= \sum_{n'} |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \times \frac{1}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

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。

↓

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

- λ^0 のオーダー：

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

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

$C_{nm} \to \lambda C_{nm}^{(1)} + \lambda^2 C_{nm}^{(2)} + \cdots$

・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）

$\downarrow$

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

⇝ $\langle \phi_n | \to$

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

$\langle \phi_l | \to \quad (l \neq n)$

$$C_{nl}^{(1)} E_l^{(0)} + \langle \phi_l | V | \phi_n \rangle = E_n^{(0)} C_{nl}^{(1)}$$

⇝ $$\boxed{C_{nl}^{(1)} = \frac{\langle \phi_l | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}}$$

摂動論がよい近似 $\to$ $|C_{nl}^{(1)}| \ll 1$

$\leftrightarrow \quad |\langle \phi_l | V | \phi_n \rangle| \ll |E_n^{(0)} - E_l^{(0)}|$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

$$\psi_n = \sum_m \alpha_m \phi_m$$

$$= \alpha_n \phi_n + \sum_{m \neq n} \alpha_m \phi_m$$

$$= \alpha_n \left[\phi_n + \sum_{m \neq n} \underbrace{\frac{\alpha_m}{\alpha_n}}_{\equiv C_{nm}} \phi_m \right]$$

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）

$$\langle\phi_n|\psi_n^{(2)}\rangle = \langle\phi_n|\sum_{m\neq n} c_{nm}^{(2)}\phi_m\rangle = 0$$

$$\langle\phi_n|\psi_n^{(0)}\rangle = \langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1$$

※ 基底状態（$n=0$）に対しては，

$E_n^{(0)} - E_l^{(0)} < 0$ （$n=0$ は最低エネルギー状態）

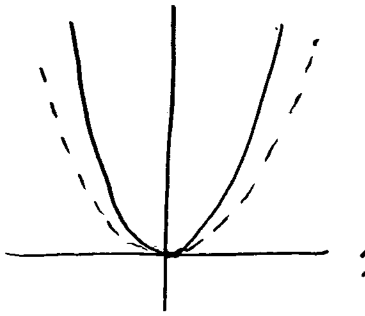
$$\langle\phi_n|V|\phi_l\rangle\langle\phi_l|V|\phi_n\rangle = |\langle\phi_n|V|\phi_l\rangle|^2 > 0$$

$\Downarrow$

$$E_{n=0}^{(2)} < 0$$

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

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

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

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

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

$\Downarrow$

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

$\Downarrow$

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

$2\hbar\omega$ ———	$\Longrightarrow$	——— $2\hbar\omega + 36\varepsilon$
$\hbar\omega$ ———		——— $\hbar\omega + 12\varepsilon$
0 ———		——— 0

非調和性.