Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

2. 時間に依存する摂動論

2.1. 時間に依存する結合方程式

$$H = H_0 + \underbrace{V(t)}_{\substack{\text{時間に依存} \\ \text{(小さな外場)}}}$$

H_0 の固有値，固有関数はわかっているとする：

$$H_0 \phi_n = E_n \phi_n$$

$t=0$ で系が ϕ_n の状態にあったとする

$$\psi(t=0) = \phi_n$$

→ $\boxed{\text{時間に依存するポテンシャル } V(t) \text{ が加わった時，系はどのように時間発展するか？}}$

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \left(H_0 + V(t) \right) \psi(t) \\ \psi(t=0) = \phi_n \end{cases}$$

を（近似的に）解く。

$$\psi(t) = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\, \phi_k$$ と展開

$$C_k(t=0) = \delta_{k,n}$$

$\downarrow$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_k \left(i\hbar\, \dot{C}_k + E_k C_k \right) e^{-iE_k t/\hbar}\, \phi_k$$

$$H_0 \psi = \sum_k E_k C_k\, e^{-iE_k t/\hbar}\, \phi_k$$

$$H_0 \phi_k = E_k \phi_k$$

$\downarrow$

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k\, e^{-iE_k t/\hbar}\, \phi_k = V(t) \sum_k C_k\, e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k$$

$\langle \phi_m | \rightarrow$

$$i\hbar\, \dot{C}_m\, e^{-iE_m t/\hbar} = \sum_k C_k\, e^{-iE_k t/\hbar} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle$$

$\downarrow$

$$\boxed{i\hbar\, \dot{C}_m = \sum_k \underbrace{e^{iE_m t/\hbar} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle e^{-iE_k t/\hbar}}_{\equiv\, \tilde{V}_{mk}(t)} C_k}$$

(note) 相互作用表示

$$i\hbar\,\partial_t |\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t))\,|\psi(t)\rangle$$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar}\,|\psi(t)\rangle$$ という変換を定義

(相互作用表示)

$\downarrow$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \cancel{-H_0 e^{iH_0t/\hbar}}\,|\psi(t)\rangle + e^{iH_0t/\hbar}\cdot\underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle}_{=\,(\cancel{H_0}+V)\,|\psi(t)\rangle}$$

$$= e^{iH_0t/\hbar}\,V\,|\psi(t)\rangle$$

$$= \underbrace{e^{iH_0t/\hbar}\,V\,e^{-iH_0t/\hbar}}_{\equiv\,\tilde{V}}\cdot\underbrace{e^{iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle}_{=\,|\tilde{\psi}(t)\rangle}$$

(note) $$\langle\phi_m|\tilde{V}|\phi_k\rangle = e^{iE_mt/\hbar}\langle\phi_m|V|\phi_k\rangle \times e^{-iE_kt/\hbar}$$

$$= \tilde{V}_{mk}.$$

2.2 時間に依存する摂動論

$$\begin{cases} i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_k C_k(t) \tilde{V}_{mk}(t) \\ C_m(t=0) = \delta_{m,n} \end{cases}$$

$\downarrow$

$$C_m(t) = \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_k \underset{\uparrow}{C_k(t')} \tilde{V}_{mk}(t')$$

ここに右辺全体を代入する

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t')$$

$$\times \left\{ \delta_{k,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} dt'' \sum_l \underset{\uparrow}{C_l(t'')} \tilde{V}_{kl}(t'') \right\}$$

ここにさらに右辺全体を代入する

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \tilde{V}_{mn}(t')$$

$$+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t') \tilde{V}_{kn}(t'')$$

$$+ \cdots$$

$$\equiv C_m^{(0)}(t) + C_m^{(1)}(t) + C_m^{(2)}(t) + \cdots$$

$$C_m^{(0)}(t) = \delta_{m,n}$$

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \ \tilde{V}_{mn}(t')$$ ：1次の摂動

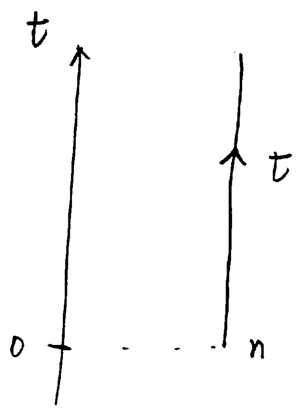
$$C_m^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t')\,\tilde{V}_{kn}(t'')$$

：2次の摂動

◎ グラフ的理解

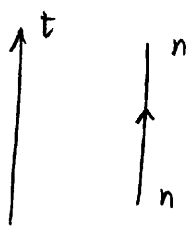
（準備）　$V(t)=0$ のとき

$$\psi(t) = e^{-iE_n t/\hbar}\,\phi_n$$



・0次の摂動

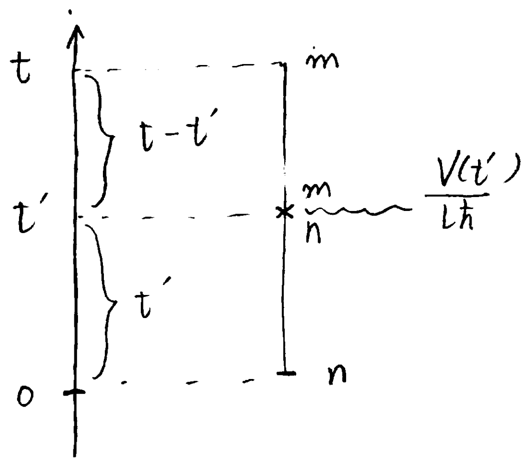
$$e^{-iE_m t/\hbar}\, C_m^{(0)}(t) = e^{-iE_n t/\hbar}\,\delta_{m,n}$$



・1次の摂動

$$e^{-iE_m t/\hbar} c_m^{(1)}(t) = e^{-iE_m t/\hbar} \int_0^t dt' \, e^{iE_m t'/\hbar} \cdot \frac{V_{mn}(t')}{i\hbar} \times e^{-iE_n t'/\hbar}$$

$$= \int_0^t dt' \, e^{-iE_m(t-t')/\hbar} \cdot \frac{V_{mn}(t')}{i\hbar} e^{-iE_n t'/\hbar}$$



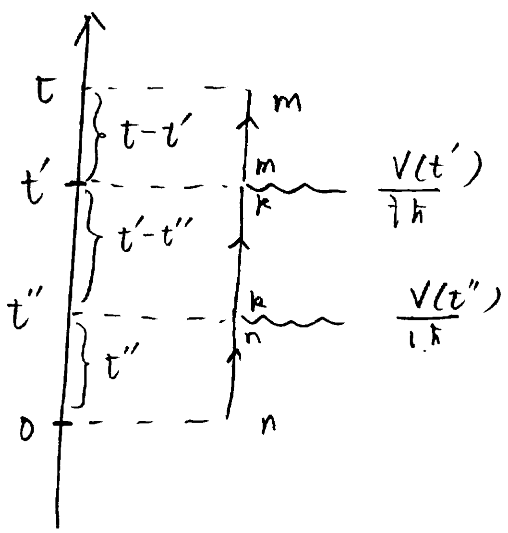
※ t' は $0 \leq t' \leq t$ のどこでもいいので積分.

・2次の摂動

$$e^{-iE_m t/\hbar}\, c_m^{(2)}(t)$$

$$= \int_0^t dt' \;\; e^{-iE_m(t-t')/\hbar}\, \frac{V_{mk}(t')}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \; \sum_k e^{-iE_k(t'-t'')/\hbar}$$

$$\times \frac{V_{kn}(t'')}{i\hbar}\, e^{-iE_n t''/\hbar}$$



以下 高次の項も同様

◎ 摂動による遷移

$$\psi(t) = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\, \phi_k$$

↔ $t>0$ において波動関数は様々な状態の重ね合わせ

⟷ 摂動を加えた後で系の状態を観測すれば最初の状態 n と異なる状態 k に系が存在する確率がある。
「摂動により $n \to k$ へ遷移した」

遷移確率

$$P_k(t) = |\langle \phi_k | \psi(t) \rangle|^2$$

$$= |C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}|^2$$

$$= |C_k(t)|^2$$

$k \neq n$ の場合

$$C_k(t) = C_k^{(1)}(t) + C_k^{(2)}(t) + \cdots$$

$\downarrow$

$$P_k(t) \sim |C_k^{(1)}(t)|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \; \tilde{V}_{kn}(t') \right|^2$$

$k = n$ の場合

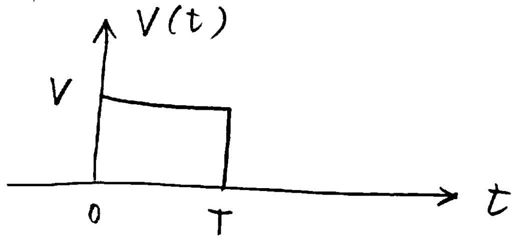
$$P_n(t) = 1 - \sum_{k \neq n} P_k(t)$$

(※ この式は 2次の摂動まで考慮することによって導出可)

$$e^{i\theta}-1 = e^{\frac{i\theta}{2}}\left(e^{\frac{i\theta}{2}}-e^{-\frac{i\theta}{2}}\right)$$
$$= e^{\frac{i\theta}{2}} \cdot 2i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

2.3 時間を含まない摂動による遷移

$$V(t) = \hat{V} \quad (0 \le t \le T)$$



$$C_k^{(1)}(T) = \int_0^T \tilde{V}_{kn}(t)\,dt \quad \times \frac{1}{i\hbar}$$

$$= V_{kn} \int_0^T e^{i(E_k-E_n)t/\hbar}\,dt \times \frac{1}{i\hbar}$$

$$= V_{kn} \frac{\hbar}{i(E_k-E_n)} \left(e^{i(E_k-E_n)T/\hbar} - 1\right) \times \frac{1}{i\hbar}$$

$$= V_{kn} \frac{\hbar}{iE_{kn}} e^{iE_{kn}T/2\hbar}\left(e^{iE_{kn}T/2\hbar} - e^{-iE_{kn}T/2\hbar}\right) \times \frac{1}{i\hbar}$$

$$E_{kn} \equiv E_k - E_n$$

$$= 2 \cdot \frac{V_{kn}}{E_{kn}} e^{iE_{kn}T/2\hbar} \sin\left(\frac{E_{kn}T}{2\hbar}\right)$$

↓

$$P_k(t) = \left(\frac{V_{kn}}{E_{kn}}\right)^2 \cdot 4\sin^2\left(\frac{E_{kn}}{2\hbar}T\right)$$

- 収束の条件（高次の摂動項が小さくなるための条件）

$$|V_{kn}| \ll |E_{kn}|$$

又は

$$|E_{kn}T/2\hbar| \ll 1$$