

# 9. 摂動論, 変分法 と

No.

Date

## 準古典近似

87

### 9-1 摂動論

摂動論は量子力学で最も重要な概念

↓  
近似的に扱う

#### 9-1-1 摂動論の定式化

1)  $\text{Schrödinger} = \text{P.L. } H$  の

$$H = H_0 + H'$$

2)  $H_0$  は可解系  
とする。

但し  $H'$  は 十分小さい

$\left\{ \begin{array}{l} H_0 : \text{非摂動項} \\ H' : \text{摂動項} \end{array} \right.$  といふ

○ 仮定 :  $H_0$  の固有値と固有関数は  
わかっているとする

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

また  $\psi_n^{(0)}$  は 完全規格直交系 となっているとする

- 目的 :  $H'$  の効果と摂動のよさを求める

$$H = H_0 + \lambda H'$$

と書き直す

この  $\lambda$  は  $H'$  の小さな程度を表現  
 として  $\lambda = 1$  とおく

- Schrödinger 方程式

$$H \Psi = E \Psi$$

そこで  $\Psi$  と  $E$  を  $\lambda$  で展開する

$$\begin{cases} \Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots \\ E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots \end{cases}$$

$$\begin{cases} \lambda = 0 \text{ の時は } H_0 \text{ の固有関数} \\ \text{固有値に求める} \end{cases}$$

$$(H_0 + \lambda H') (\Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots)$$

$$= (E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots) (\Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots)$$

$$\begin{cases} \bullet \lambda^0 : & H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0 & (1) \\ \bullet \lambda^1 : & H_0 \Psi_1 + H' \Psi_0 = E_0 \Psi_1 + E_1 \Psi_0 & (2) \\ \bullet \lambda^2 : & H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0 & (3) \end{cases}$$

(a) 第0次 :

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$$

これは非摂動項  $\alpha$  場合との同

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

$$\therefore \begin{cases} E_0 \rightarrow E_n^{(0)} \\ \Psi_0 \rightarrow \Psi_n^{(0)} \end{cases} \quad \text{に対応}$$

(b)  $\lambda^1$  (第1次) :

$$H_0 \Psi_1 + H' \Psi_0 = E_0 \Psi_1 + E_1 \Psi_0$$

今後は基底状態  $n=n_0$  に対応

摂動  $E_1$  と  $\Psi_1$  を求める。

$$(E_0 = E_{n_0}) (\Psi_0 = \Psi_{n_0}^{(0)})$$

①  $\Psi_1$  と  $\Psi_n^{(0)}$  の展開式

$$\Psi_1 = \sum C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}$$

(ここで  $C_n^{(1)}$  は定数)

この時, (2) 式は

$$H_0 \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + H' \Psi_{n_0}^{(0)} = E_{n_0}^{(0)} \cdot \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + E_1 \Psi_{n_0}^{(0)}$$

ここで左から  $\langle \Psi_{n_0}^{(0)} |$  をかいて内積をとる

$$\langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H_0 | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

$$= E_{n_0}^{(0)} \cdot \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + E_1 \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

ここで  $\Psi_n^{(0)}$  は 完全規格直交系となっている

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_{n'}^{(0)} \rangle = \delta_{nn'}$$

②  $\langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H_0 | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle$  の計算

$$\langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H_0 | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle = E_{n_0} \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle$$

$$= E_{n_0} \sum_n C_n^{(1)} \delta_{n_0, n} = C_{n_0}^{(1)} E_{n_0}^{(0)}$$

これより

$$E_1 = \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

とある。

この式は結局、1次の摂動エネルギー  $E_1$  は

$(H'$  は 基底状態 の波動関数  $\Psi_{n_0}^{(0)}$  )  
2- 期待値 である。

これを示すには

$$\begin{aligned} \textcircled{\circ} \Psi_1 \text{ の求め方: } H_0 \sum c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + H' \Psi_{n_0}^{(0)} &= \\ E_{n_0}^{(0)} \sum c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + E_1 \Psi_{n_0}^{(0)} \end{aligned}$$

この式に左から  $\langle \Psi_k^{(0)} |$  をかけて内積をとる

$$\begin{aligned} &\langle \Psi_k^{(0)} | H_0 | \sum c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + \langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle \\ &= E_{n_0}^{(0)} \langle \Psi_k^{(0)} | \sum c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + \langle \Psi_k^{(0)} | E_1 \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

但し:  $k \neq n_0$  とする

すなわち 状態  $|\Psi_k^{(0)}\rangle$  は基底状態以外

2, 2

"  $C_k^{(1)}$

$$E_n^{(0)} \langle \Psi_k^{(0)} | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + \langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

$$= E_{n_0}^{(0)} \langle \Psi_k^{(0)} | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle + E_1 \underbrace{\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}_{=0}$$

" $\perp$ "  
 $C_k$

= 0 2)

$$C_k^{(1)} = \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$k \neq n_0$

1 2) 3)

$$\Psi_1 = \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \cdot \Psi_k^{(0)}$$

2) 3)

(c)  $\lambda^2$  (第2次の摂動方程式) :

$$H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0$$

但し,

$$\begin{cases} E_0 = E_{n_0}^{(0)} \\ \Psi_0 = \Psi_{n_0}^{(0)} \\ \Psi_1 = \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)} \end{cases}$$

222.  $\Psi_2$  は  $\Psi_n^{(0)}$  の展開可也 :

$$\Psi_2 = \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)}$$

これを(3)式に代入.

$$H_0 \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} + H' \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}$$

$$= E_{n_0} \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} + E_1 \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)} + E_2 \Psi_{n_0}^{(0)}$$

29式に左から  $\langle \Psi_{n_0}^{(0)} |$  をかけて内積を取ると

$$n_0 \neq k, n \quad (\text{注意可也!!})$$

$$E_{n_0} \sum_{n \neq n_0} C_n^{(1)} d_{n, n_0}$$

94

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H_0 \cdot \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \rangle + \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H' | \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)} \rangle \\ &= E_{n_0} \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \rangle + E_1 \cdot \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)} \rangle \\ & \quad + E_2 \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

d, c

$$E_2 = - \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H' | \Psi_k^{(0)} \rangle \langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_{n_0}^{(0)}}$$

$$\text{or } E_2 = - \sum_{k \neq n_0} \frac{|\langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H' | \Psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{n_0}^{(0)}}$$

↓

これは常に負である!!

すなわち、2次の摂動エネルギーは

基底状態 に対しては常に引き力