No.

Date

10-1-1 摂動論の定式化

ハミルトニアン H が

$$\boxed{H = H_0 + H'}$$

で与えられている系を考える.

この場合, H' は十分小さいとする.

$\begin{cases} H_0 : \text{非摂動項} \\ H' : \text{摂動項} \end{cases}$ という

- 仮定: (i) H_0 の固有値, 固有関数はわかっている.

$$\boxed{H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}} \quad (n = 1, 2, \cdots)$$

((0) は非摂動項の意味)

(ii) $\Psi_n^{(0)}$ は完全規格直交系をなしている.

- 目的: H' の効果を摂動的に求める.

$$\boxed{H = H_0 + \lambda H'}$$ と書き直す

{ λ は H' の小ささの程度を表わす
最後に $\lambda=1$ とおきます }

解くべき Schrödinger 方程式は

$$\boxed{(H_0 + \lambda H')\Psi = E\Psi}$$

ここで Ψ と E を λ のべきで展開

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \cdots$$

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots$$

{ $\lambda=0$ の項は H_0 の固有関数
固有値そのものである }

No.

Date

$$\boxed{\begin{aligned}&(H_0+\lambda H')(\Psi_0+\lambda\Psi_1+\lambda^2\Psi_2+\cdots)\\&=(E_0+\lambda E_1+\lambda^2E_2+\cdots)(\Psi_0+\lambda\Psi_1+\lambda^2\Psi_2+\cdots)\end{aligned}}$$

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

(a) 第0次 :

$$H_0\Psi_0=E_0\Psi_0$$

これは非摂動項そのもの.

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

よって
$$\begin{cases}E_0\to E_n^{(0)}\\ \Psi_0\to\Psi_n^{(0)}\end{cases}$$
となる.

(b) 第1次 :

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

以後は 基底状態 $n=n_0$

における摂動エネルギーを求める

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

【解法】 Ψ_1 を $\Psi_n^{(0)}$ で展開する.

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

（ここで, $C_n^{(1)}$ は定数）

この時 (2) 式は

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

となる.

この式の左から $\Psi_{n_0}^{(0)*}$ をかけて積分（内積をとる）

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

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

$\Psi_n^{(0)}$ は完全規格直交系だから

$$\boxed{\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_{n'}^{(0)} \rangle = \delta_{nn'}}$$ が成立つ.

よって

$$\begin{cases} \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | H_0 | \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle = E_{n_0} \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle \\ = E_{n_0} \sum C_n^{(1)} \delta_{n_0,n} = C_{n_0}^{(1)} E_{n_0}^{(0)} \\ \langle \Psi_{n_0}^{(0)} | \sum C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle = C_{n_0}^{(1)} \end{cases}$$

より

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

が求まる。

このより　1次の摂動エネルギー　E_1 は
H' を基底状態の非摂動波動関数 $\Phi_{n_0}^{(0)}$
で期待値をとればよい!!

この結果は覚えておく事!!

- Φ_1 の求め方：

$$H_0 \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} + H' \Phi_{n_0}^{(0)} = E_{n_0}^{(0)} \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} + E_1 \Phi_{n_0}^{(0)}$$

この式に左から　$\Phi_k^{(0)*}$　$(k \neq n_0)$ をかけて内積をつくる

$$\langle \Phi_k^{(0)} | H_0 | \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} \rangle + \langle \Phi_k^{(0)} | H' | \Phi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

$$= E_{n_0}^{(0)} \langle \Phi_k^{(0)} | \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} \rangle + \langle \Phi_k^{(0)} | E_1 \Phi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

$k \neq n_0$ に注意して

$$\overbrace{E_k^{(0)} \langle \Psi_k^{(0)} | \sum C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle}^{C_k^{(1)}} + \langle \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_{n_0}^{(0)} \rangle$$

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

よって

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

すなわち

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

と表わされる

(c) 第2次：

$$\underline{H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0} \qquad (3)$$

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

● Ψ_2 を $\Psi_n^{(0)}$ で展開する

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

(3)式に代入.

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

この式に左から $\Psi_{n_0}^{(0)*}$ をかけて積分し両項を比べる

$$(n_0 \neq k, n)$$

$$\overbrace{\left\langle \Phi_{n_0}^{(0)} \middle| H_0 \cdot \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Phi_n^{(0)} \right\rangle}^{=0} + \left\langle \Phi_{n_0}^{(0)} \middle| H' \middle| \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Phi_k^{(0)} | H' | \Phi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Phi_k^{(0)} \right\rangle$$

$$= E_{n_0} \overbrace{\left\langle \Phi_{n_0}^{(0)} \middle| \sum_{n \neq n_0} C_n^{(2)} \Phi_n^{(0)} \right\rangle}^{=0} + E_1 \underbrace{\left\langle \Phi_{n_0}^{(0)} \middle| \sum_{k \neq n_0} \frac{\langle \Phi_k^{(0)} | H' | \Phi_{n_0}^{(0)} \rangle}{E_{n_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \cdot \Phi_k^{(0)} \right\rangle}_{=0}$$

$$+ E_2 \underbrace{\langle \Phi_{n_0}^{(0)} | \Phi_{n_0}^{(0)} \rangle}_{=1}$$

よって

$$\boxed{E_2 = - \sum_{k \neq n_0} \frac{\left| \langle \Phi_{n_0}^{(0)} | H' | \Phi_k^{(0)} \rangle \right|^2}{E_k^{(0)} - E_{n_0}^{(0)}}}$$

と求まる。

これは $\boxed{\text{常に負}}$ である。

2次の摂動エネルギーは

$\boxed{\text{基底状態において常に引力}}$