非定常摂動量子系の時間発展は,

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = \sum_n c_n(t) |n\rangle \\ \forall \mathrm{i}\ \hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} c_m(t) = \sum_n V_{mn}(t) \mathrm{e}^{i\omega_{mn}t} c_n(t) \end{cases} \tag{0.0.1}$$

で表されるのであった．一般に**式** (**??**) を解くことはできないので，近似解を得ることを考える．$\hat{V}(t) \to \lambda\hat{V}(t)$ として $c_m(t)$ をべき級数展開すると,

$$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \cdots \tag{0.0.2}$$

となる．**式** (**??**) を**式** (**??**) の第 2 式に代入すると,

$$\forall m\ \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \cdots\right) = \sum_n \lambda V_{mn}(t) \mathrm{e}^{i\omega_{mn}t}\left(c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \cdots\right) \tag{0.0.3}$$

となるから,

$$\begin{cases} \lambda^0: & \forall m\ \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} c_m^{(0)}(t) = 0 \\ \lambda^1: & \forall m\ \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} c_m^{(1)}(t) = \sum_n V_{mn}(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t} c_n^{(0)}(t) \end{cases} \tag{0.0.4}$$

式 (**??**) の λ^0 の項の結果より,

$$\forall m\ c_m^{(0)}(t) = \mathrm{const.} \tag{0.0.5}$$

である．

$t = t_0$ から摂動 $\hat{V}(t)$ を加え始めたときを考える．$t = t_0$ で系の量子状態が $|i\rangle$ であったとする．このとき,

$$c_m^{(0)}(t_0) = \delta_m^i \tag{0.0.6}$$

である．**式** (**??**) より，0 次の係数 $c_m(t)$ は時間変化しないので,

$$c_m^{(0)}(t) = \delta_m^i \tag{0.0.7}$$

となる．この系の状態は初期状態 $|i\rangle$ に依ることがわかったので，これからは $c_m(t) \to c_{m,i}(t)$，$c_m^{(0)}(t) \to c_{m,i}^{(0)}(t)$，$c_m^{(1)}(t) \to c_{m,i}^{(1)}(t)$ のように書き替える．**式** (**??**) の λ^1 の係数より,

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} c_{m,i}^{(1)}(t) = \sum_n V_{mn}(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t} c_{n,i}^{(0)}(t) \tag{0.0.8}$$

$$= V_{m,i}(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mi}t} \tag{0.0.9}$$

$$\Rightarrow c_{m,i}^{(1)}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{m,i}(t) \mathrm{e}^{i\omega_{mi}t}\,\mathrm{d}t \tag{0.0.10}$$

となり，$c_{m,i}^{(1)}(t)$ が求まった．また，系の量子状態を λ^1 の項までで近似すると,

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = \sum_n c_{n,i}(t) |n\rangle \tag{0.0.11}$$

$$\simeq \sum_n \left(c_{n,i}^{(0)}(t) + c_{n,i}^{(1)}(t)\right) |n\rangle \tag{0.0.12}$$

$$= |i\rangle + \sum_n c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \tag{0.0.13}$$

$$= |i\rangle + c_{i,i}^{(1)}(t) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \tag{0.0.14}$$

と表される．なお今後のために，$c^{(1)}_{n,i}$ で $n=i$ と $n\neq i$ に分けた．まとめると，$|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}=|i\rangle$ の時間発展は以下のように書ける．

$|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}=|i\rangle$ の時間発展

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} &= \left(1+c^{(1)}_{i,i}(t)\right)|i\rangle+\sum_{n\neq i}c^{(1)}_{n,i}(t)\,|n\rangle \\ c^{(1)}_{n,i}(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_{n,i}\mathrm{e}^{i\omega_{ni}t}\,\mathrm{d}t \end{cases} \tag{0.0.15}$$

また，始状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ $(f\neq i)$ への遷移確率は，

$$\left|\langle f|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}\right|^2=\left|\left(1+c^{(1)}_{i,i}(t)\right)\langle f|i\rangle+\sum_{n\neq i}c^{(1)}_{n,i}(t)\,\langle f|n\rangle\right|^2 \tag{0.0.16}$$

$$=\left|c^{(1)}_{f,i}(t)\right|^2 \tag{0.0.17}$$

である．

さて，このようにして得られた $|\psi\rangle_{\mathrm{I}}$ の時間発展について，次節では $\hat{V}$ が一定のときを，次々節では $\hat{V}$ が余弦関数で書けるときを議論する．