

摂動項が時間に依存する場合の摂動 (time-dependent perturbation)¹を扱う。本節では、量子系の時間発展が状態ベクトルの時間変化で描像する Schrödinger 描像で記述する。時間に依存する Schrödinger 方程式,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (0.0.1)$$

を考える。なお、 $|\psi(t)\rangle$ は $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルを用いて,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (0.0.2)$$

と展開できたとする。 $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルが完全系を成すので、状態ベクトルが時間変化した空間は $\{|n\rangle \mid n = 0, 1, \dots\}$ が張る空間の部分空間となることに注意する。以下の議論では特に断らない限り、 $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルは Schmidt の直交化法などを用いて、正規直交化してあるものとする。 \hat{H} の性質ごとに $|\psi(t)\rangle$ の具体的な形を議論する。

1. $\hat{H} = \hat{H}^{(0)}$ の場合²

量子状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は時間発展演算子³⁴ $\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)$ を用いて,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |\psi(0)\rangle \quad (0.0.3)$$

$$= \sum_n c_n(0) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (0.0.4)$$

$$= \sum_n c_n(0) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (0.0.5)$$

のように表すことができる。

時間発展演算子を用いることなく計算することもできる。式 (0.0.2) を式 (0.0.1) に代入すると、 \hat{H} が時間に依存しないことに注意すれば,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_n c_n(t) |n\rangle \right) = \hat{H} \left(\sum_n c_n(t) |n\rangle \right) \quad (0.0.6)$$

$$\Leftrightarrow \sum_n \left(i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle \right) = \sum_n (c_n(t) E_n |n\rangle) \quad (0.0.7)$$

$$\Leftrightarrow \forall n \ i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle = c_n(t) E_n |n\rangle \quad (0.0.8)$$

$$\Leftrightarrow \forall n \ c_n(t) = \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \quad (0.0.9)$$

を用いれば,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (0.0.10)$$

を得る。

¹電磁波による摂動など。

² $\hat{H}^{(0)}$ は厳密に解けるハミルトニアン。

³ $\Delta t \ll 1$ として,

$$|\psi(\Delta t)\rangle = \exp\left[-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t\right] |\psi(0)\rangle \approx \left(\hat{I} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t\right) |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle + \Delta t \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle\right) \Big|_{t=0}$$

より微分の形で書けることから、確かに時間発展すると解釈できる。

⁴演算子が交換するときは数字と同じ扱いをしても良いと考える。一般に演算子は,

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp\left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots\right\} \neq e^{\hat{A} + \hat{B}}$$

なる BCH 式を満たす。



2. $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)$ の場合

このときは $|\psi(t)\rangle$ を簡単な形で書き下すことが出来ないから、便宜的に、

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (0.0.11)$$

と展開しておく．なお， $c_n(t)$ が定数のときの $|\psi(t)\rangle$ との整合性をとるために $c_n(t)$ に $\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$ をかけてある．原理的には $c_n(t)$ が求まれば量子系の時間発展の様子がわかる．

さて，いずれの場合でも，量子系の性質を調べるには $c_n(t)$ の具体的な形がわかればよいことを発見した．本節では，まず Schrödinger 表示から相互作用表示に書き換え， $c_n(t)$ を厳密に特定することが困難であることを知り， $c_n(t)$ の近似解を導く．式 (0.0.1) と式 (0.0.11) をまとめて，Schrödinger 表示の非定常摂動基本方程式と呼ぶ．

