

摂動項が時間に依存する場合の摂動 (time-dependent perturbation)<sup>1</sup>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<sup>2</sup>

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

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

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

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

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,

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

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

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

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

を用いれば,

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

を得る。

<sup>1</sup>電磁波による摂動など。

<sup>2</sup> $\hat{H}^{(0)}$  は厳密に解けるハミルトニアン。

<sup>3</sup> $\Delta t \ll 1$  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私は解釈する。

<sup>4</sup>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  $\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$  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、 $c_n(t)$  を厳密に知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．