

非定常摂動量子系の時間発展は,

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

で表されるのであった. 一般に式 (0.0.1) を解くことはできないので, 近似解を得ることを考える. $\hat{V}(t) \rightarrow \lambda \hat{V}(t)$ とし $c_m(t)$ をべき級数展開すると,

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

となる. 式 (0.0.2) を式 (0.0.1) の第 2 式に代入すると,

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

となるから,

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

式 (0.0.4) の λ^0 の項の結果より,

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

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,

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

である. 式 (0.0.5) より, 0 次の係数 $c_m(t)$ は時間変化しないので,

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

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 $c_m(t) \rightarrow c_{m,i}(t)$, $c_m^{(0)}(t) \rightarrow c_{m,i}^{(0)}(t)$, $c_m^{(1)}(t) \rightarrow c_{m,i}^{(1)}(t)$ のように書き替える. 式 (0.0.4) の λ^1 の係数より,

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

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

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

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,

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_{n,i}(t) |n\rangle \quad (0.0.11)$$

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

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

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

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

$|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$ の時間発展

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I &= \left(1 + c_{i,i}^{(1)}(t)\right) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \\ c_{n,i}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{n,i} e^{i\omega_{ni}t} dt \end{cases} \quad (0.0.15)$$

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

$$|\langle f|\psi(t)\rangle_I|^2 = \left| \left(1 + c_{i,i}^{(1)}(t)\right) \langle f|i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) \langle f|n\rangle \right|^2 \quad (0.0.16)$$

$$= \left| c_{f,i}^{(1)}(t) \right|^2 \quad (0.0.17)$$

である．

さて，このようにして得られた $|\psi\rangle_I$ 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．

