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，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle \tag{0.0.1}$$

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

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_n c_n(t)\left|n\right\rangle \tag{0.0.2}$$

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 $\{\left|n\right\rangle \mid n = 0, 1, \cdots\}$ 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 $\left|\psi(t)\right\rangle$ 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 $\left|\psi(t)\right\rangle$ の時間発展は時間発展演算子[3][4] $\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)$ を用いて，

$$\begin{aligned}\left|\psi(t)\right\rangle &= \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right)\left|\psi(0)\right\rangle &(0.0.3)\\ &= \sum_n c_n(0)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right)\left|n\right\rangle &(0.0.4)\\ &= \sum_n c_n(0)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right)\left|n\right\rangle &(0.0.5)\end{aligned}$$

   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，

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_n c_n(t)\left|n\right\rangle\right) &= \hat{H}\left(\sum_n c_n(t)\left|n\right\rangle\right) &(0.0.6)\\ \Leftrightarrow \sum_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_n(t)\left|n\right\rangle\right) &= \sum_n\left(c_n(t)E_n\left|n\right\rangle\right) &(0.0.7)\\ \Leftrightarrow \forall n\ \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_n(t)\left|n\right\rangle &= c_n(t)E_n\left|n\right\rangle &(0.0.8)\\ \Leftrightarrow \forall n\ c_n(t) &= \exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right) &(0.0.9)\end{aligned}$$

   を用いれば，

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

   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，

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

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．

[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，

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

なる BCH 公式を満たす．

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，

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

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 $\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right)$ 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．