〈摂動論の基礎〉

1

解ける問題は少ない...

- エネルギー固有値・固有状態が求められる
- 状態の時間発展が計算できる

摂動論 「解ける問題 + わずかな変更」を近似的に解く

わずかな変更 = 摂動

一般的な設定

$\hat{H}_0$ 非摂動ハミルトニアン（もとのハミルトニアン）

(1) $\hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \quad n=1,2,\cdots$

$\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\}_{n=1,2,\cdots}$ は正規直交完全系

これがわかっているとする

(2) $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ の固有値・固有状態を近似的に求める

λ: 小さいパラメーター

$\hat{V}$: 摂動ハミルトニアン

§縮退のないエネルギー固有状態への摂動

$j=1,2,\cdots$ をひとつ固定 → $E_j^{(0)}$ は縮退していないと仮定

(1) $\hat{H}|\varphi_j\rangle = E_j|\varphi_j\rangle$ となる E_j と $|\varphi_j\rangle$ をセットで求める

(2) $\lambda \to 0$ で $|\varphi_j\rangle \to |\varphi_j^{(0)}\rangle$, $E_j \to E_j^{(0)}$ を要請

λについてのベキ展開

(3) $E_j = E_j^{(0)} + \lambda E_j^{(1)} + \lambda^2 E_j^{(2)} + \cdots$

λによらない

(4) $|\varphi_j\rangle = |\varphi_j^{(0)}\rangle + \lambda|\varphi_j^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varphi_j^{(2)}\rangle + \cdots$

規格化はしない　　規格化されている

(5) $\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(k)}\rangle = 0$　$k=1,2,\cdots$ と仮定してよい

（もしそうでなければ $|\varphi_j^{(k)}\rangle$ に $\alpha|\varphi_j^{(0)}\rangle$ をたして $|\varphi_j^{(k)}\rangle$ を再定義すればいい　$\alpha = -\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(k)}\rangle$）

$$\begin{cases} (1) \quad E_j = E_j^{(0)} + \lambda E_j^{(1)} + \lambda^2 E_j^{(2)} + \cdots \\ (2) \quad |\varphi_j\rangle = |\varphi_j^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_j^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_j^{(2)}\rangle + \cdots \end{cases}$$

Schrödinger方程式 (3) $(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})|\varphi_j\rangle = E_j |\varphi_j\rangle$ に代入.

$$(4) \quad (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})\left(|\varphi_j^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_j^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_j^{(2)}\rangle + \cdots\right)$$
$$= \left(E_j^{(0)} + \lambda E_j^{(1)} + \lambda^2 E_j^{(2)} + \cdots\right)\left(|\varphi_j^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_j^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_j^{(2)}\rangle + \cdots\right)$$

展開し λの各々の次数をみる

0次 (5) $\hat{H}_0 |\varphi_j^{(0)}\rangle = E_j^{(0)} |\varphi_j^{(0)}\rangle \rightarrow$ 知ってる

1次 (6) $\hat{H}_0 |\varphi_j^{(1)}\rangle + \hat{V} |\varphi_j^{(0)}\rangle = E_j^{(0)} |\varphi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(1)} |\varphi_j^{(0)}\rangle$

2次 (7) $\hat{H}_0 |\varphi_j^{(2)}\rangle + \hat{V} |\varphi_j^{(1)}\rangle = E_j^{(0)} |\varphi_j^{(2)}\rangle + E_j^{(1)} |\varphi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(2)} |\varphi_j^{(0)}\rangle$

⋮

1次摂動(エネルギー固有値)

P3-(6) (1) $\hat{H}_0|\varphi_j^{(1)}\rangle + \hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle = E_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(1)}|\varphi_j^{(0)}\rangle$

$|\varphi_j^{(0)}\rangle$ と (1) の内積 (2) 左辺 $= \underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{H}_0|\varphi_j^{(1)}\rangle}_{E_j^{(0)}\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle = 0} + \underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}_{\text{残る}}$

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ なので

$\hat{A}|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \rightarrow \langle\varphi|\hat{A} = a\langle\varphi|$

(3) 右辺 $= E_j^{(0)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle}_{0} + E_j^{(1)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(0)}\rangle}_{1}$

よって (4) $E_j^{(1)} = \langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle$

エネルギー固有値の補正

(5) $\boxed{E_j = E_j^{(0)} + \langle\varphi_j^{(0)}|\underbrace{\lambda\hat{V}}_{\text{摂動}}|\varphi_j^{(0)}\rangle + O(\lambda^2)}$

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$

1次摂動(エネルギー固有状態)

P3-(6)　(1) $\hat{H}_0|\varphi_j^{(1)}\rangle+\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle=E_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle+E_j^{(1)}|\varphi_j^{(0)}\rangle$

$|\varphi_j^{(1)}\rangle$をもとめよう　　$\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\}_{n=1,2,\cdots}$は正規直交完全系

展開　(2) $|\varphi_j^{(1)}\rangle=\sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty}\alpha_n|\varphi_n^{(0)}\rangle$　　係数　(3) $\alpha_n=\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle$

$\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle=0$

$|\varphi_n^{(0)}\rangle$と(1)の内積

$n\neq j$

(4) 左辺 $=\underbrace{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{H}_0|\varphi_j^{(1)}\rangle}_{=E_n^{(0)}\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle=E_n^{(0)}\alpha_n}+\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle$

(5) 右辺 $=E_j^{(0)}\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle+E_j^{(1)}\underbrace{\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_j^{(0)}\rangle}_{=0}=E_j^{(0)}\alpha_n$

(6) $\alpha_n=\dfrac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}}$　$(n\neq j)$

よって

(7) $|\varphi_j^{(1)}\rangle=\sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty}\dfrac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}}|\varphi_n^{(0)}\rangle=\sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty}\dfrac{|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}}$

2次摂動 (エネルギー固有値)

P3-(7) (1) $\hat{H}_0|\varphi_j^{(2)}\rangle + \hat{V}|\varphi_j^{(1)}\rangle = E_j^{(0)}|\varphi_j^{(2)}\rangle + E_j^{(1)}|\varphi_j^{(1)}\rangle + E_j^{(2)}|\varphi_j^{(0)}\rangle$

$|\varphi_j^{(0)}\rangle$と(1)の内積

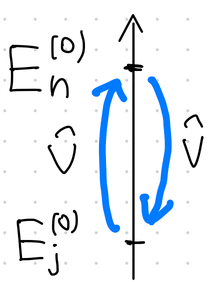
(2) 左辺 $= E_j^{(0)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(2)}\rangle}_{=0} + \langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(1)}\rangle$

(3) 右辺 $= E_j^{(0)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(2)}\rangle}_{=0} + E_j^{(1)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(1)}\rangle}_{=0} + E_j^{(2)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_j^{(0)}\rangle}_{=1}$

よって

(4) $E_j^{(2)} = \langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(1)}\rangle$

P5-(7) $$= \sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty} \frac{\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}} = \sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty} \frac{|\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle|^2}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}}$$



jからnに行き、
またjに戻る過程

$j=1$ (基底状態)なら
$$\boxed{E_1^{(2)} < 0}$$

2次摂動でかならずエネルギーが下がる。

▷ エネルギー固有値（1次＋2次）まとめ

(1) $\hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \qquad n=1,2,\cdots$

jをひとつ固定 → $E_j^{(0)}$は縮退していない（仮定）

小さな摂動ハミルトニアン $\hat{V}$

λ=1とした

(2) $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

$\hat{H}$のエネルギー固有値

(3) $$\boxed{E_j \simeq E_j^{(0)} + \langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{n=1 \\ (n\neq j)}}^{\infty} \frac{|\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle|^2}{E_j^{(0)} - E_n^{(0)}}}$$

- まず1次摂動を求める
- もし1次摂動がたまたまゼロなら2次も計算 → めんどう.

III 高次の摂動(補足)

移項した

P3-(4)の λ^mの項 (1) $(\hat{H}_0-E_j^{(0)})|\varphi_j^{(m)}\rangle+\hat{V}|\varphi_j^{(m-1)}\rangle=\sum_{k=0}^{m-1}E_j^{(m-k)}|\varphi_j^{(k)}\rangle$

$|\varphi_j^{(0)}\rangle$と(1)の内積 → (2) $E_j^{(m)}=\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(m-1)}\rangle$

(3) $\hat{W}_j=\sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty}\dfrac{|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|}{E_j^{(0)}-E_n^{(0)}}$ と定義　　明らかに (4) $\hat{W}_j|\varphi_j^{(0)}\rangle=0$

$\hat{H}$のスペクトル分解

(5) $\hat{H}_0-E_j^{(0)}=\sum_{n=1}^{\infty}(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|$　より

(6) $\hat{W}_j(\hat{H}_0-E_j^{(0)})=-\sum_{\substack{n=1\\(n\neq j)}}^{\infty}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|=|\varphi_j^{(0)}\rangle\langle\varphi_j^{(0)}|-\hat{1}$

$m\geq 1$として (1)に$\hat{W}_j$を作用

(7) $\underbrace{\hat{W}_j(\hat{H}_0-E_j^{(0)})|\varphi_j^{(m)}\rangle}_{-|\varphi_j^{(m)}\rangle}+\hat{W}_j\hat{V}|\varphi_j^{(m-1)}\rangle=\sum_{k=1}^{m-1}E_j^{(m-k)}W_j|\varphi_j^{(k)}\rangle$

よって

(8) $|\varphi_j^{(m)}\rangle=W_j\hat{V}|\varphi_j^{(m-1)}\rangle-\sum_{k=1}^{m-1}E_j^{(m-k)}W_j|\varphi_j^{(k)}\rangle$

P8-(8) (1) $|\varphi_j^{(m)}\rangle = \hat{W}_j \hat{V} |\varphi_j^{(m-1)}\rangle - \sum_{k=1}^{m-1} E_j^{(m-k)} \hat{W}_j |\varphi_j^{(k)}\rangle$

P8-(2) (2) $E_j^{(m)} = \langle \varphi_j^{(0)} | \hat{V} | \varphi_j^{(m-1)} \rangle$

(1), (2)の右辺には $m-1$ 以下の量のみが現れる → これを次々と解いていけばよい.

(3)
$$|\varphi_j^{(2)}\rangle = \hat{W}_j \hat{V} |\varphi_j^{(1)}\rangle - E_j^{(1)} \hat{W}_j |\varphi_j^{(1)}\rangle$$
$$= \sum_{\substack{n,n'=1 \\ (n\neq n')}}^{\infty} \frac{|\varphi_n^{(0)}\rangle \langle \varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{n'}^{(0)}\rangle \langle \varphi_{n'}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{(E_j^{(0)}-E_n^{(0)})(E_j^{(0)}-E_{n'}^{(0)})}$$
$$- \langle \varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\varphi_n^{(0)}\rangle \langle \varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{(E_j^{(0)}-E_n^{(0)})^2}$$

(4)
$$E_j^{(3)} = \langle \varphi_j^{(0)} | \hat{V} | \varphi_j^{(2)} \rangle$$
$$= \sum_{\substack{n,n'=1 \\ (n\neq n')}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle \langle \varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{n'}^{(0)}\rangle \langle \varphi_{n'}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{(E_j^{(0)}-E_n^{(0)})(E_j^{(0)}-E_{n'}^{(0)})}$$
$$- \langle \varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\langle \varphi_j^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle \langle \varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_j^{(0)}\rangle}{(E_j^{(0)}-E_n^{(0)})^2}$$

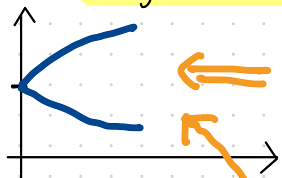
などなど

§縮退しているエネルギー固有値・固有状態への摂動

例1-(1)　(1) $\hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$

あるjについて $E_j^{(0)}=E_{j+1}^{(0)}$ (他の$E_n^{(0)}$は異なる)とする → 2重縮退

$E_j^{(0)}=E_{j+1}^{(0)}$



⇐ λ>0とすると 普通は2つの固有値に差が生じる. → 「縮退が解ける」という

$\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$の固有値

最低次の摂動

(2) $|\psi_1\rangle=|\varphi_j^{(0)}\rangle$, $|\psi_2\rangle=|\varphi_{j+1}^{(0)}\rangle$ と置く → (3) $\langle\psi_k|\psi_l\rangle=\delta_{k,l}$ $(k,l=1,2)$

$\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$の固有状態を (4) $\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle+\lambda|\varphi^{(1)}\rangle+O(\lambda^2)$ と書く

未知

ここでも $\langle\psi_k|\varphi^{(1)}\rangle=0$ $(k=1,2)$ と仮定してよい

Sch. eq.

ϵ とかく

(5) $(\hat{H}_0+\lambda\hat{V})(\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle+\lambda|\varphi^{(1)}\rangle+\cdots) = (E_j^{(0)}+\lambda \boxed{E_j^{(1)}}+\cdots)(\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle+\lambda|\varphi^{(1)}\rangle+\cdots)$

λの1次

(6) $\hat{H}_0|\varphi^{(1)}\rangle+\alpha\hat{V}|\psi_1\rangle+\beta\hat{V}|\psi_2\rangle = E_j^{(0)}|\varphi^{(1)}\rangle+\epsilon\alpha|\psi_1\rangle+\epsilon\beta|\psi_2\rangle$

(1) $\hat{H}_0|\varphi^{(1)}\rangle + \alpha\hat{V}|\psi_1\rangle + \beta\hat{V}|\psi_2\rangle = E_j^{(0)}|\varphi^{(1)}\rangle + \epsilon\alpha|\psi_1\rangle + \epsilon\beta|\psi_2\rangle$

$|\psi_1\rangle$と(1)の内積 → (2) $\alpha\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_1\rangle + \beta\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_2\rangle = \epsilon\alpha$

$|\psi_2\rangle$と(1)の内積 → (3) $\alpha\langle\psi_2|\hat{V}|\psi_1\rangle + \beta\langle\psi_2|\hat{V}|\psi_2\rangle = \epsilon\beta$

(4) $W_{kl} = \langle\psi_k|\hat{V}|\psi_l\rangle$ とすれば $(k, l = 1, 2)$

(2),(3)は (5) $\underbrace{\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}}_{= W}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \epsilon\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ と書ける

$W_{12}^* = W_{21}$ より
W は エルミート行列

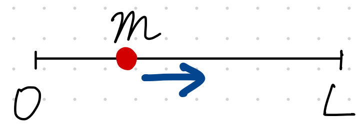
Wの固有値 $\epsilon_\pm$, 対応する固有ベクトル $\begin{pmatrix} \alpha_\pm \\ \beta_\pm \end{pmatrix}$

→ $\epsilon_+ \neq \epsilon_-$ ならば縮退が解ける!

近似的な
- エネルギー固有値 (6) $E_j^{(0)} + \lambda\epsilon_\pm$
- 固有状態 (7) $|\psi_\pm\rangle = \alpha_\pm|\psi_1\rangle + \beta_\pm|\psi_2\rangle$

(参考
- $\epsilon_\pm = \frac{1}{2}\left\{W_{11} + W_{22} \pm \sqrt{(W_{11} - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}\right\}$
- $E_j^{(0)}$が m重に縮退している場合もほとんど同様)

§ 摂動計算の例 → 人工的な例題



▷ 縮退のない場合

1次元の区間 $[0,L]$ 中の質量 m の粒子ひとつ　(1) $\varphi(0)=\varphi(L)=0$

• 非摂動系　ハミルトニアン　(2) $\hat{H}_0=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$

Schrödinger方程式　(3) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)=E\varphi(x)$

$n=1,2,\cdots$ について

(4) $\varphi_n^{(0)}(x)=\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$　(5) $E_n^{(0)}=E_0 n^2$　縮退なし　(6) $E_0=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

• 任意の摂動ポテンシャル　$V(x)$

(7) $\hat{H}=\hat{H}_0+V(\hat{x})$　(Sch.eq. (8) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$)

エネルギーの1次補正　(8) $E_j=E_j^{(0)}+E_j^{(1)}+\cdots$　($\lambda=1$とした)

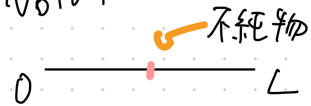
(9) $E_j^{(1)}=\langle\varphi_j^{(0)}|V(\hat{x})|\varphi_j^{(0)}\rangle=\displaystyle\int_0^L dx\,\{\varphi_j^{(0)}(x)\}^* V(x)\,\varphi_j(x)=\frac{2}{L}\int_0^L dx\left(\sin\frac{j\pi}{L}x\right)^2 V(x)$

(1) $E_j^{(1)} = \frac{2}{L}\int_0^L dx \left(\sin\frac{j\pi}{L}x\right)^2 V(x)$ ← 具体的な $V(x)$ について計算すればいい

v_0 は定数

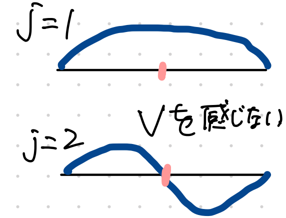
• 例1

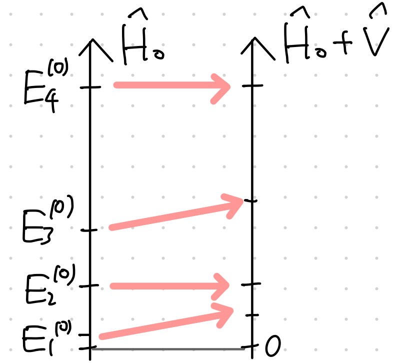
(2) $V(x) = v_0 L\,\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)$



(3) $E_j^{(1)} = \frac{2}{L}\int_0^L dx \left(\sin\frac{j\pi}{L}x\right)^2 v_0 L\,\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)$

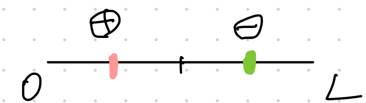
$= 2v_0\left(\sin\left(\frac{j\pi}{2}\right)\right)^2 = \begin{cases} 2v_0 & j\ 奇数 \\ 0 & j\ 偶数 \end{cases}$





• 例2

(4) $V(x) = v_0 L\left\{\delta\left(x-\frac{L}{4}\right) - \delta\left(x-\frac{3}{4}L\right)\right\}$



(5) $E_j^{(1)} = \frac{2}{L}\int_0^L dx \left(\sin\frac{j\pi}{L}x\right)^2 v_0 L\left\{\delta\left(x-\frac{L}{4}\right) - \delta\left(x-\frac{3}{4}L\right)\right\}$

$= 2v_0\left\{\left(\sin\frac{j\pi}{4}\right)^2 - \left(\sin\frac{3j\pi}{4}\right)^2\right\} = 0$

$\sin\left(j\pi - \frac{j\pi}{4}\right) = \pm\sin\left(\frac{j\pi}{4}\right)$

1次摂動ではエネルギーの補正なし → 2次摂動!

この例で基底エネルギー E_1 への2次摂動からの補正を求めよう

公式 (1) $$E_1^{(2)} = \sum_{n\neq 1} \frac{|\langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_1^{(0)} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

(2) $$\langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_1^{(0)} \rangle = \int_0^L dx \left(\varphi_n^{(0)}(x)\right)^* v_0 L \left\{ \delta\left(x-\frac{L}{4}\right) - \delta\left(x-\frac{3}{4}L\right) \right\} \varphi_1^{(0)}(x)$$

$$= 2v_0 \int_0^L dx \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \left\{ \delta\left(x-\frac{L}{4}\right) - \delta\left(x-\frac{3}{4}L\right) \right\}$$

$$= 2v_0 \left\{ \sin\frac{n\pi}{4} \sin\frac{\pi}{4} - \sin\frac{3n\pi}{4} \sin\frac{3\pi}{4} \right\} = \sqrt{2}\, v_0 \left\{ \sin\frac{n\pi}{4} - \sin\frac{3n\pi}{4} \right\}$$

$$\left(\sin\frac{3n\pi}{4} = \sin\left(n\pi - \frac{n\pi}{4}\right) = \underbrace{\sin(n\pi)}_{=0} \cos\left(\frac{n\pi}{4}\right) - \underbrace{\cos(n\pi)}_{= \begin{cases} 1 & n\text{偶} \\ -1 & n\text{奇} \end{cases}} \sin\left(\frac{n\pi}{4}\right) \right)$$

$$= \begin{cases} 2\sqrt{2}\, v_0 \sin\left(\frac{n\pi}{4}\right) & n\text{偶} \\ 0 & n\text{奇} \end{cases}$$

n 偶のとき (3) $$\sin\left(\frac{n\pi}{4}\right) = \begin{cases} \pm 1 & \frac{n}{2}\text{奇} \\ 0 & \frac{n}{2}\text{偶} \end{cases}$$

よって

(1) $$|\langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_1^{(0)} \rangle|^2 = \begin{cases} 8(V_0)^2 & n\text{偶かつ}\ \frac{n}{2}\ \text{奇} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

$$\frac{n}{2} = 2k+1 \quad (k=0,1,2,\cdots) \rightarrow n = 4k+2$$

(2) $$E_1^{(2)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{8(V_0)^2}{E_0 - E_0(4k+2)^2} = \frac{8(V_0)^2}{E_0} \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{1-(4k+2)^2}}_{= -\frac{\pi}{8}}$$

$$= -\frac{\pi (V_0)^2}{E_0}$$

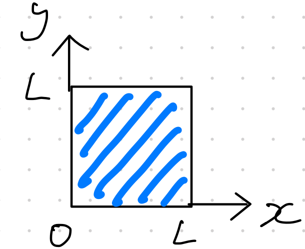
← 少しエネルギーが下がる

(iii) 縮退のある場合

2次元の自由粒子への摂動

(x,y)　$0 \le x \le L,\ 0 \le y \le L$

境界では $\varphi(x,y)=0$



非摂動Schrödinger方程式

(1) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x,y) = E\,\varphi(x,y)$$

エネルギー固有状態 (2) $$\varphi^{(0)}_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)$$

エネルギー固有値 (3) $$E^{(0)}_{n_x,n_y} = E_0\{n_x^2+n_y^2\}$$ (4) $$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

(5) $n_x, n_y = 1,2,3,\cdots$

- 基底状態 (6) $$\varphi^{(0)}_{1,1} = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)$$ (7) $$E_{GS} = 2E_0$$

- 第1励起状態

(8) $$\varphi^{(0)}_{1,2}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) =: \psi_1(x,y) \rightarrow |\psi_1\rangle$$

(9) $$\varphi^{(0)}_{2,1}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) =: \psi_2(x,y) \rightarrow |\psi_2\rangle$$

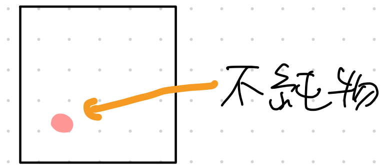
(10) $$E^{(0)}_{1st} = E_0\{2^2+1^2\} = 5E_0$$

2重縮退!

2重縮退したエネルギー固有状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ への摂動の影響

摂動の例 (1) $V(x,y) = v_0 L^2 \delta(x-\frac{L}{4})\,\delta(y-\frac{L}{4})$

v_0 は定数 (ここでも $\lambda=1$ とした)



p11-(4)

(2) $W_{kl} = \langle \psi_k | \hat{V} | \psi_l \rangle$ により行列 W を求める

(3) $\langle \psi_1 | \hat{V} | \psi_2 \rangle = \int dx \int dy\, \psi_1^*(x,y)\, V(x,y)\, \psi_2(x,y)$

$$= 4v_0 \int_0^L dx \int_0^L dy \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \delta\left(x-\frac{L}{4}\right) \delta\left(y-\frac{L}{4}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)$$

$$= 4v_0 \left(\sin\frac{\pi}{4}\right)^2 \left(\sin\frac{\pi}{2}\right)^2 = 2v_0$$

他の $k,l=1,2$ についても (たまたま) (4) $\langle \psi_k | \hat{V} | \psi_l \rangle = 2v_0$

よって (5) $W = \begin{pmatrix} 2v_0 & 2v_0 \\ 2v_0 & 2v_0 \end{pmatrix} = 2v_0 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

(1) $W = 2v_0 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

(2) $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ の固有値・固有ベクトル $\begin{cases} \lambda = 2, & \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \lambda = 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$

W の固有値は $4v_0, 0$ 　固有ベクトルは同じ

近似的なエネルギー固有状態・固有値

(3) $\begin{cases} |\psi_-\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\}, & E_- \simeq 5E_0 \\ |\psi_+\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\}, & E_+ \simeq 5E_0 + 4v_0 \end{cases}$

縮退が解けた!