低ポンプ領域における有効理論を用いたKPOの解析

2023 年 10 月 12 日

目次

第 I 部

Introduction

1 property of the KPO model Hamiltonian

次の KPO Hamiltonian を考える：

$$\hat{H}_{\mathrm{KPO}} = \hat{H}_0 + p\hat{V} \tag{1}$$

$$\hat{H}_0 = \Delta \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\chi}{2}\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a} \tag{2}$$

$$\hat{V} = (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) \tag{3}$$

ここで，$\hat{H}_0$ は対角化できており，エネルギー固有状態とエネルギー固有値は以下で与えられる：

$$\hat{H}_0 = \Delta \hat{n} + \frac{\chi}{2}\hat{n}(\hat{n}-1) \tag{4}$$

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad E_n = \Delta n + \frac{\chi}{2}n(n-1) \tag{5}$$

このとき，基底状態と各励起状態が縮退する条件は固有エネルギーが 0 となるとき，すなわち，

$$E_n = \Delta n + \frac{\chi}{2}n(n-1) = 0 \tag{6}$$

$$\Delta = -\frac{\chi}{2}(n-1) \tag{7}$$

となる．

2 いくつかの数値計算結果

上に示した KPO の Hamiltonian の興味深い性質を確認するために，次の GKSL 型マスター方程式を用いて数値計算を行った：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i\left[\hat{H}_{\mathrm{KPO}},\ \rho\right] + \frac{\gamma}{2}\left(2\hat{a}\rho\hat{a}^\dagger - \left\{\hat{a}^\dagger\hat{a}, \rho\right\}\right). \tag{8}$$

図 1, 2 はマスター方程式の定常状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{ss}} \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ を数値計算によって求め，その平均光子数 $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}\rangle \equiv \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{ss}}\hat{a}^\dagger\hat{a}]$ をパラメトリックドライブ p，detuning Δ をそれぞれ変え，求めた．図に示すように，Detuning が Kerr 係数 χ とが

$$\Delta = -\frac{\chi}{2}(n-1) \tag{9}$$

の条件（これを共鳴条件と呼ぶ.）を満たすとき，わずかなパラメトリックドライブでさえ，平均光子数が急激に増加していることがわかる．

3 このノートの目的

このノートでは，なぜ，共鳴条件 Eq.(9) を満たすとき，わずかなパラメトリックドライブで，平均光子数が急激に増加しているのかを理論的に解明するためのノートである．理論解析の手法として，時間に依存しない

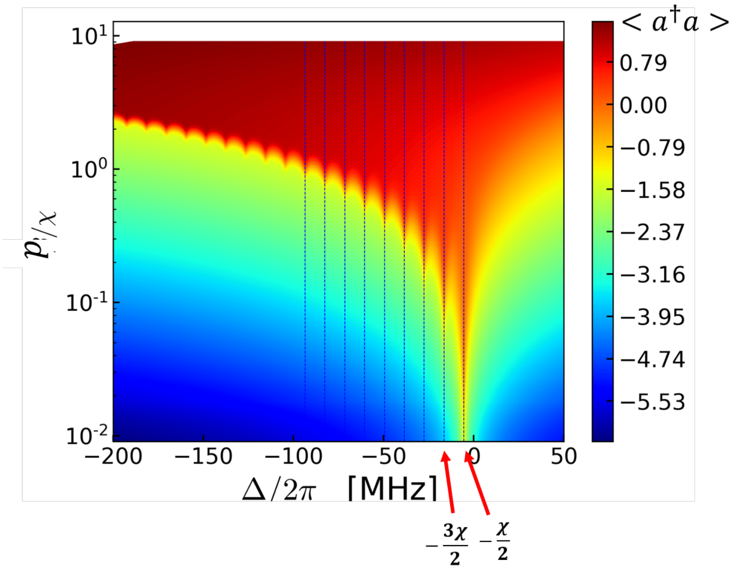

図 1　z 軸は平均光子数に常用対数を取ったもの．$Kerr/2\pi = 11$ MHz, $\gamma/2\pi = 1.4$ MHz．x 軸は detuning, y 軸はパラメトリックドライブを表す．

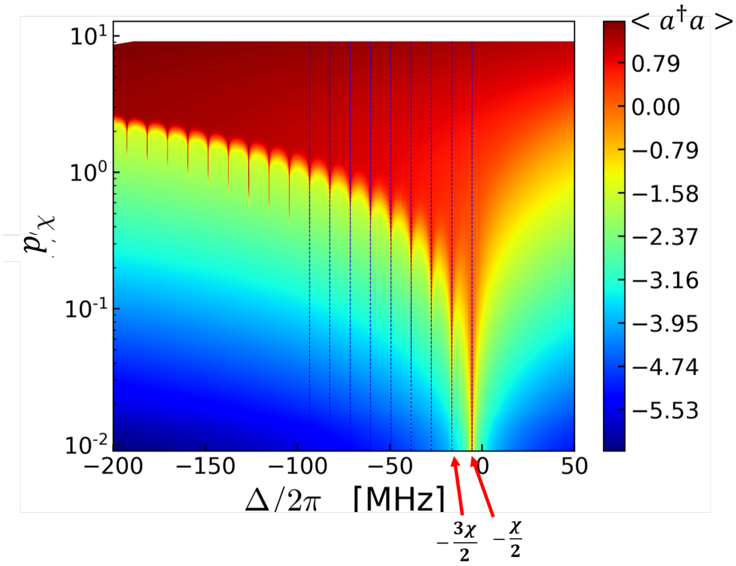

図 2　z 軸は平均光子数に常用対数を取ったもの．$Kerr/2\pi = 11$ MHz, $\gamma/2\pi = 0.0001$ MHz．x 軸は detuning, y 軸はパラメトリックドライブを表す．

縮退のある場合の摂動論を用いる．また，おまけとして，Schrieffer-Wolff 変換や Peter Knight perturbation (断熱消去?) などの摂動論による解析も（あまりうまくはいかなかったが）試みたので，紹介する．

4　KPO Hamiltonian の行列表示

KPO Hamiltonian に対して，Detuning Δ を共鳴条件 Eq.(9) を満たすようにとる．このとき，摂動 Hamiltonian $\hat{V} = (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2})$ は 2 光子駆動を表しているため，Hamiltonian は偶数サイトと奇数サイトにブロック対角化可能である．今回注目するのは，基底状態と偶数番目の励起状態が縮退する場合であり，図 3 のような有効模型を考えることができる．つまり，KPO Hamiltonian を偶数番目の Fock 状態で展開し，次のように行列で表現することが可能である：

$$\hat{H}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \cdots & \cdots \end{array} \\ \begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{array} & \begin{pmatrix} E_0 & \sqrt{2\cdot 1}p & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ \sqrt{2\cdot 1}p & E_2 & \sqrt{4\cdot 3}p & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \sqrt{4\cdot 3}p & E_4 & \sqrt{6\cdot 5}p & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}p & E_6 & \sqrt{8\cdot 7}p & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}p & E_8 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ldots & \ddots & \vdots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \vdots \end{pmatrix} \end{array} \tag{10}$$

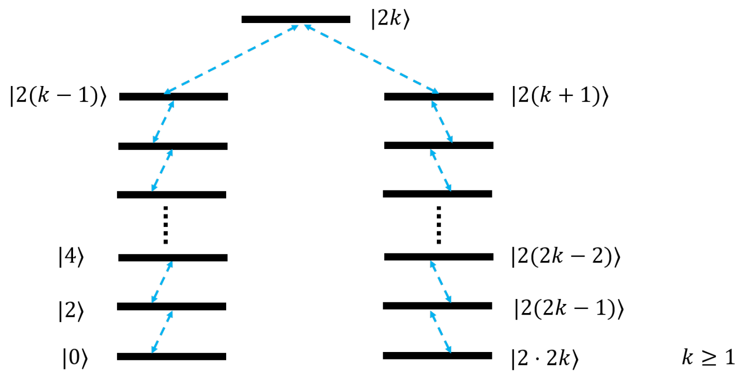

図 3　KPO の有効モデルの一般系

具体例を見てみると，$n = 4, (k = 1)$，すなわち，0 と 4 が縮退する場合，有効モデルは，図 4 のようになり，Hamiltonian の行列表示は,

$$\hat{H}^{\mathrm{eff}0\to 4}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| \end{array} \\ \begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \end{array} & \begin{pmatrix} E_0 & \sqrt{2\cdot 1}p & 0 \\ \sqrt{2\cdot 1}p & E_2 & \sqrt{4\cdot 3}p \\ 0 & \sqrt{4\cdot 3}p & E_4 \end{pmatrix} \end{array} \tag{11}$$

となる．

$n = 8, (k = 2)$，すなわち，0 と 8 が縮退する場合，有効モデルは，図 5 のようになり，Hamiltonian の行

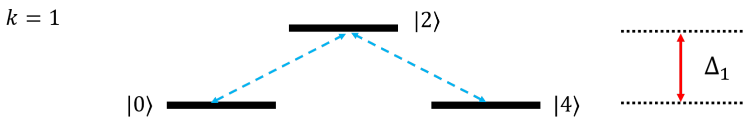

図 4　基底状態と 4 励起状態が縮退する場合の KPO の有効モデル

列表示は,

$$
\hat{H}^{\mathrm{eff}}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
E_0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 & E_2 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 & E_4 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 & E_6 & p_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 & E_8 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & E_{10} & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & E_{12}
\end{pmatrix}
\end{array}
= \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 & \Delta_1 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 & \Delta_2 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 & \Delta_1 & p_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & -\Delta_3 & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & -\Delta_4
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{12}
$$

となる．このとき，$E_0 = E_8 = 0$, $p_1 = \sqrt{2\cdot 1}p$, $p_2 = \sqrt{4\cdot 3}p$, $p_3 = \sqrt{6\cdot 5}p$, $p_4 = \sqrt{8\cdot 7}p$, $p_5 = \sqrt{10\cdot 9}p$, $p_6 = \sqrt{12\cdot 11}p$ である．である．

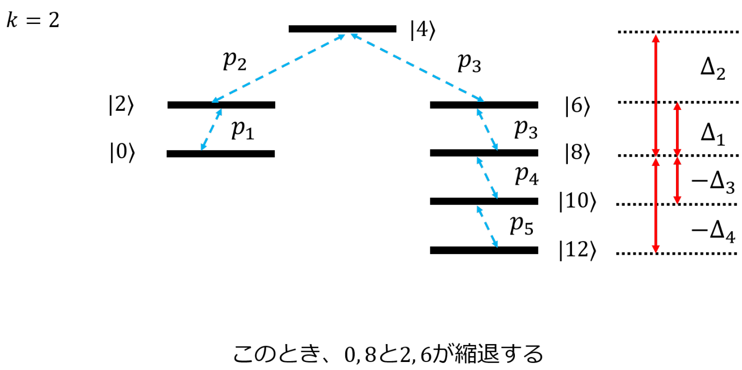

図 5　基底状態と 8 励起状態が縮退する場合の KPO の有効モデル

第 II 部
時間に依存しない摂動論

　ここでは，時間に依存しない摂動論の一般論について，解説し，摂動論を使う際に有用な近似公式を導出する．

5　時間に依存しない摂動論 (time-independent perturbation theory)

調和振動子や水素原子など，Schrödinger 方程式を解析的に解ける例は極めて少ない．そこで，近似的に Schrödinger 方程式を解く必要がある．Schrödinger 方程式を近似的に解く方法の一つとして，摂動論がある．摂動論は完全に解ける問題に対して，わずかな補正（摂動）を与えた場合を近似的に解く方法である．本書では，時間に依存せず，縮退のない場合の摂動論について論じる．

5.1　問題設定

いま，解くべき Schrödinger の固有値方程式は

$$\hat{H}\,|\varphi_n\rangle = E_n\,|\varphi_n\rangle \quad n = 1, 2, \cdots \tag{13}$$

とする．いま，我々が求めたいのは (13) のエネルギー固有値 E_n とその固有状態 $|\varphi_n\rangle$ であるが，それらの厳密解をえることができないとする．すなわち，(13) は厳密には解けないとする．(13) の与えられた物理系のハミルトニアン $\hat{H}$ が

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} \tag{14}$$

の形をもつとする．すると，(13) は

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})\,|\varphi_n\rangle = E_n\,|\varphi_n\rangle \quad n = 1, 2, \cdots \tag{15}$$

とかける．ここで，λ は無次元のパラメータで十分に小さい ($\lambda \ll 1$) とする．$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン，$\hat{V}$ を摂動ハミルトニアン，または摂動ポテンシャルとよぶ．ハミルトニアンが (14) でかかれるとき，$\hat{H}_0$ の Schrödinger の固有値方程式

$$\hat{H}_0\,|\varphi_n^{(0)}\rangle = \epsilon_n\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{16}$$

は完全に解けるものとし，(16) の固有状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ の無限個の集合 $\left\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\right\}_{n=1,2,\cdots}$ は正規直交完全系をなすものとする．また，ϵ_n は $\hat{H}_0$ のエネルギー固有値であり，ここでは，縮退のある場合を考える．固有値方程式 (15) において，次のことを要請する．

要請 5.1　$\lambda \to 0$ のとき $E \to \epsilon_n$ となる

つまり，固有値方程式 (15) の解で要請 5.1 をみたすものを求める．

5.2　摂動方程式

摂動を受けたハミルトニアン (14) の固有値問題 (15)，すなわち，

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})\,|\varphi_n\rangle = E_n\,|\varphi_n\rangle \quad n = 1, 2, \cdots \tag{17}$$

を解きたい．λ は十分小さいとするから，摂動の影響は λ のべき級数に展開して考えることができるだろう．(17) のエネルギー固有値 E_n と固有状態 $|\varphi_n\rangle$ を λ でべき級数展開する：

$$E_n = \epsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots\cdots \tag{18}$$

$$|\varphi_n\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle + \cdots\cdots \tag{19}$$

ここで，$E_n^{(0)}$ に当たるところを ϵ_n としたのは，要請 5.1 による．

(17) 両辺へ (28) と (29) を代入すると，

$$\begin{aligned}\left(\hat{H}_0+\lambda\hat{V}\right)&\left(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots\right)\\ &=\left(\epsilon_n+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+\cdots\right)\left(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots\right)\end{aligned} \tag{20}$$

となる．次にこの式の両辺を λ のべきで整理して，同じべきの項を等しいとおく．これが摂動論の原理である．これはこの等式が十分小さい λ に対して常に成り立つという要求にほかならない．

(20) の両辺を λ のべきで整理し，同べきの項をとりだす：

$$\lambda^0:\qquad \hat{H}_0\,|\varphi_n^{(0)}\rangle=\epsilon_n\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{21}$$

$$\lambda^1:\qquad \hat{H}_0\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+\hat{V}\,|\varphi_n^{(0)}\rangle=\epsilon_n\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(1)}\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{22}$$

$$\lambda^2:\qquad \hat{H}_0\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+\hat{V}\,|\varphi_n^{(1)}\rangle=\epsilon_n\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(1)}\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{23}$$

$$\lambda^3:\qquad \hat{H}_0\,|\varphi_n^{(3)}\rangle+\hat{V}\,|\varphi_n^{(2)}\rangle=\epsilon_n\,|\varphi_n^{(3)}\rangle+E_n^{(1)}\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(2)}\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(3)}\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{24}$$

$$\vdots$$

$$\lambda^N:\qquad \hat{H}_0\,|\varphi_n^{(N)}\rangle+\hat{V}\,|\varphi_n^{(N-1)}\rangle=\epsilon_n\,|\varphi_n^{(N)}\rangle+\sum_{k=1}^{N}E_n^{(N)}\,|\varphi_n^{(N-k)}\rangle \tag{25}$$

これを摂動方程式という．

6 時間に依存しない縮退のある摂動論

6.1 縮退について

エネルギー固有値 ϵ_n に属する $\hat{H}_0$ の固有値が N 重縮退している場合を考える．これらの縮退している固有状態を区別するために，量子数 $\alpha=1,2,\ldots,N$ を導入し，$|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle$ と書くことにする．そして，これらについて規格直交化しておく：

$$\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle=\delta_{\alpha,\beta} \tag{26}$$

また，ϵ_n 以外の他の固有状態 ϵ_m に属する固有ベクトルを $|\varphi_m^{(0)}\rangle$ で表し，$\langle\varphi_{m'}^{(0)}|\varphi_m^{(0)}\rangle=\delta_{m',m}$ とする．さらにこのとき，$\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_m^{(0)}\rangle=0$, $(\alpha=1,2,\ldots,N)$ である．

縮退のある場合，N 個の固有ベクトル $|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle$ のほかに，これらの任意の重ね合わせもまた $\hat{H}_0$ の固有ベクトルである．そこで，Sch.eq の解として，次も考えられる：

$$|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle=\sum_{\beta=1}^{N}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle C_\beta, \tag{27}$$

後に，重ね合わせ状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle$ は，縮退がとけた場合のインデックスを書き加え，修正を行うことに注意．係数 C_β を求めることで，$\hat{H}_0$ の固有状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle$ が決まる．このとき，$\hat{H}$ の固有状態，固有値に関する摂動展開と摂動方程式は，それぞれ，次のように与えられる：

$$E_n=\epsilon_n+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+\cdots\cdots \tag{28}$$

$$|\varphi_n\rangle=|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle+\lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots\cdots \tag{29}$$

$$\lambda^0: \qquad \hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle = \epsilon_n|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{30}$$

$$\lambda^1: \qquad (\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(1)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{31}$$

$$\lambda^2: \qquad (\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(2)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})\,|\varphi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{32}$$

$$\lambda^3: \qquad (\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(3)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})\,|\varphi_n^{(2)}\rangle - E_n^{(2)}|\varphi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(3)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{33}$$

$$\vdots$$

$$\lambda^N: \qquad (\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(N)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})\,|\varphi_n^{(N)}\rangle - E_n^{(2)}|\varphi_n^{(1)}\rangle - \cdots - E_n^{(N)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{34}$$

6.2 基本解法

6.3 エネルギー固有値の補正値

エネルギー固有値の補正値の 1 次近似について考える．そのために，Eq. (31)

$$(\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(1)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{35}$$

に左から，$|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle$ を書けると，

$$(\epsilon_n - \epsilon_n)\,\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)}\rangle = \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle - E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{36}$$

$$(\epsilon_n - \epsilon_n)\,\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\,C_\beta - \sum_{\beta=1}^{N}E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle C_\beta \tag{37}$$

を得る．ここで，Eq. (27) を使い，右辺を展開した．左辺第一項は明らかにゼロ，よって

$$\sum_{\beta=1}^{N}[E_n^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} - \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle]C_\beta = 0 \tag{38}$$

となる．この C_β に関する斉 1 次連立方程式が 0 以外の解を持つためには，C_β の係数のつくる行列が 0 でなくてはならない．すなわち，固有値 $E_n^{(1)}$ は以下の特性方程式の解である：

$$\det\,(E_n^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} - \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle) = 0 \tag{39}$$

この固有値方程式は重解も含めて N 個の解：$E_{n,\alpha}^{(1)}$, $(\alpha = 1, 2, \ldots, N)$ を持つ．そして，N 個のそれぞれの解 $E_{n,\alpha}^{(1)}$ を行列方程式に代入し，規格化条件 $\sum_\beta |C_\beta| = 1$ のもとで，(38) を解くことにより，それぞれの解 $E_{n,\alpha}^{(1)}$ に対する係数が決定する．その係数を改めて $C_{\beta,\alpha}$ と書き，これに対応する固有ベクトルを

$$|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\,C_{\beta,\alpha} \tag{40}$$

と書き直す．これで第 0 近似での固有状態を決めることができた．固有状態 $|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle$ を (36) の $|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle$ へ代入すると，

$$\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{41}$$

を得る．ここで，係数 $C^*_{\gamma,\beta}$ をかけて，γ について和をとると，

$$E_n^{(1)}\sum_\gamma C^*_{\gamma,\beta}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = \sum_\gamma C^*_{\gamma,\beta}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle$$

$$E_n^{(1)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{42}$$

となる．したがって，

$$E_n^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{43}$$

$$E_n^{(1)} = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{44}$$

を得る．これが，縮退のある場合のエネルギーの 1 次の補正項である．

(39) の解に重根がなく，第 1 次近似で状態 $|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle$ のすべての縮退がとけたたきの第 2 次近似のエネルギー補正項について計算する．まず (31) へ，状態ベクトル $\langle\varphi_m^{(0)}|$ をかけると，

$$(\epsilon_n-\epsilon_m)\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle = \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle - E_n^{(1)}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{45}$$

ここで，右辺第二項は

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = \sum_\beta C_{\beta,\alpha}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle = 0 \tag{46}$$

となり，$\epsilon_n \neq \epsilon_m$ であるから，

$$\tilde{C}^{(1)}_{m,\alpha} = \langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle = \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{47}$$

を得る．

また，(32) へ，状態ベクトル $\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|$ をかけると，

$$(\epsilon_n-\epsilon_n)\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle - E_n^{(1)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle - E_n^{(2)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{48}$$

ここで，左辺は 0，右辺第二項は（証明できていないが）0 になるので，

$$E_n^{(2)} = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \tag{49}$$

となる．これに完全系 $\hat{1}=\hat{P}+\hat{Q}$, where $\hat{P}=\sum_\beta|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|$, $\hat{Q}=\sum_{n\neq m}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|$ を挿入し，

$$\begin{aligned}E_{n,\alpha}^{(2)} &= \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{1}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle + \langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{Q}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \\ &= \sum_{\beta=1}^{N}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle + \sum_{m\neq n}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \\ &= \sum_{\beta=1}^{N}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle C^{(1)}_{\beta,\alpha} + \sum_{m\neq n}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\tilde{C}^{(1)}_{m,\alpha}\end{aligned} \tag{50}$$

ここで，右辺第一項に

$$E_{n,\alpha}^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{51}$$

を代入すると

$$E_{n,\alpha}^{(2)} = \sum_{\beta=1}^{N} E_n^{(1)} \delta_{\alpha,\beta} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \sum_{m \neq n} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle$$

$$= E_{n,\alpha}^{(1)} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \sum_{m \neq n} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle$$

$$= E_{n,\alpha}^{(1)} C_{\alpha,\alpha}^{(1)} + \sum_{m \neq n} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)} \tag{52}$$

を得る．ここで，右辺第一項が 0，右辺第二項に

$$\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)} = \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle = \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{53}$$

を代入することで，

$$E_{n,\alpha}^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} = \frac{\langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} \hat{Q} \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{54}$$

を得る．これが第 2 次のエネルギーの補正項である．以上をまとめると，1 次の摂動によって，縮退が解かれるとき，エネルギー固有値は

$$E_{n,\alpha} = \epsilon_n + \lambda E_{n,\alpha}^{(1)} + \lambda^2 E_{n,\alpha}^{(2)}$$

$$= \epsilon_n + \lambda \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle\langle \varphi_n^{(0)}; \alpha | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{55}$$

で与えられる．

6.4 固有状態について

ここでは (55) が成立するときの固有状態を第 1 近似で求める．(32) に左から $\langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta |$, $(\beta \neq \alpha)$，をかけると

$$(\epsilon_n - \epsilon_n) \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(2)}; \alpha \rangle = \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle - E_n^{(1)} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle - E_n^{(2)} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle \tag{56}$$

ここで，第 1 項は消え，第 3 項もまた $\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle = 0$ となるから

$$E_{n,\alpha}^{(1)} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle = \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \tag{57}$$

$$E_{n,\alpha}^{(1)} C_{\beta,\alpha}^{(1)} = \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \tag{58}$$

ここで右辺に，完全性関係 $\hat{1} = \hat{P} + \hat{Q}$ を代入すると，

$$
\begin{aligned}
E_{n,\alpha}^{(1)} C_{\beta,\alpha}^{(1)} &= \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} \hat{P} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} \hat{Q} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= \sum_{\gamma=1}^{N} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \gamma \rangle\rangle \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \gamma | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \sum_m \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= \sum_{\gamma=1}^{N} E_{n,\beta}^{(1)} \delta_{\beta,\gamma} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \gamma | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \sum_m \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= E_{n,\beta}^{(1)} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle + \sum_m \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= E_{n,\beta}^{(1)} C_{\beta,\alpha}^{(1)} + \sum_m \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)}
\end{aligned} \tag{59}
$$

となる．すなわち，

$$
(E_{n,\alpha}^{(1)} - E_{n,\beta}^{(1)}) \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle = \sum_m \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \tag{60}
$$

を得る．１次の摂動で ϵ_n の縮退はすべて解かれているから，$E_{n,\alpha}^{(1)} \neq E_{n,\beta}^{(1)}$ である．したがって，$\beta \neq \alpha$ に対して，

$$
\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)} = \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle = \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{61}
$$

をより，

$$
\begin{aligned}
C_{\beta,\alpha}^{(1)} = \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{1}{(E_{n,\alpha}^{(1)} - E_{n,\beta}^{(1)})} \langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(1)}; \alpha \rangle \\
&= \sum_{m \neq n} \frac{\langle\langle \varphi_n^{(0)}; \beta | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle \, \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)}; \alpha \rangle\rangle}{(E_{n,\alpha}^{(1)} - E_{n,\beta}^{(1)})(\epsilon_n - \epsilon_m)}, \quad \beta \neq \alpha
\end{aligned} \tag{62}
$$

よって，固有状態の 1 次補正は

$$|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle = \hat{P}\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \hat{Q}\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{\beta=1}^{N} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{\beta\neq\alpha} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{\beta\neq\alpha} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle C_{\beta,\alpha}^{(1)} + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)}$$

$$= \sum_{m\neq n}\sum_{\beta\neq\alpha} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(E_{n,\alpha}^{(1)} - E_{n,\beta}^{(1)})(\epsilon_n - \epsilon_m)} + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{63}$$

以上の結果をまとめると，λ の 1 次近似で固有状態 $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ は

$$|\varphi_n;\alpha\rangle = |\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle + \lambda\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle \tag{64}$$

$$= |\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle + \lambda\sum_{m\neq n}\left\{\sum_{\beta\neq\alpha} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(E_{n,\alpha}^{(1)} - E_{n,\beta}^{(1)})(\epsilon_n - \epsilon_m)} + |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)}\right\} \tag{65}$$

で与えられる．

6.5 1 次摂動で縮退が解けなかった場合

1 次の摂動によって，縮退が解けなかった場合を考える．(32)

6.6 エネルギー固有値の補正値

1 次近似について考える．

$$(\epsilon_n - \hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(2)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)})\,|\varphi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{66}$$

これに，左から $\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|$ を書けると，

$$(\epsilon_n - \epsilon_n)\,\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(2)}\rangle = \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)}\rangle - E^{(2)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle \tag{67}$$

$$= \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)}\rangle - \sum_{\beta=1}^{N} E_n^{(2)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle C_{\beta,\alpha} \tag{68}$$

左辺第一項は明らかにゼロ，右辺第二項もゼロ，よって

$$\sum_{\beta=1}^{N} E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}C_{\beta,\alpha} = \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)}\rangle \tag{69}$$

を得る．ここで，右辺を次のように展開する：

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)}\rangle &= \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{1}|\varphi_n^{(1)}\rangle \\
&= \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(1)}\rangle \ + \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{Q}|\varphi_n^{(1)}\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)}\rangle \ + \sum_{m\neq n}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \ + \sum_{m\neq n}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle{\color{red}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle} \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}E_n^{(1)}\delta_{\alpha,\beta}\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \ + \sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}E_{n,\alpha}^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \ + \sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \qquad (70)
\end{aligned}$$

ここで，右辺第一項は 0，右辺第二項は

$$\begin{aligned}
\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} &= \sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\left(\sum_{\beta=1}^{N}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle C_{\beta,\alpha}\right)}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}C_{\beta,\alpha} \qquad (71)
\end{aligned}$$

以上より，

$$\sum_{\beta=1}^{N}\left[E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\right]C_{\beta,\alpha}=0, \qquad (72)$$

ここで，

$$(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\equiv\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \qquad (73)$$

この C_β に関する斉 1 次連立方程式が 0 以外の解を持つためには，C_β の係数のつくる行列が 0 でなくてはならない．すなわち，固有値 $E_n^{(2)}$ は以下の特性方程式の解である：

$$\det\left(E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\right)=0 \qquad (74)$$

この固有値方程式は重解も含めて N 個の解：$E_{n,\alpha}^{(2)}$, $(\alpha=1,2,\ldots,N)$ を持つ．そして，N 個のそれぞれの解 $E_{n,\alpha}^{(2)}$ を行列方程式に代入し，規格化条件 $\sum_\beta|C_\beta|=1$ のもとで，(407) を解くことにより，それぞれの解 $E_{n,\alpha}^{(2)}$ に対する係数が決定する．その係数を改めて $C_{\beta,\alpha}$ と書き，これに対応する固有ベクトルを

$$|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\sum_{\beta=1}^{N}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\,C_{\beta,\alpha} \qquad (75)$$

と書き直す．これで第０近似での固有状態を決めることができた．固有状態 $|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle$ を (67) の $|\varphi_n^{(0)}\rangle\rangle$ へ代入すると，

$$(\epsilon_n-\epsilon_n)\,\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle=\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E^{(2)}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{76}$$

を得る．左辺と右辺第二項は $\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(k)};\alpha\rangle=0$ より，ゼロ．したがって，

$$E_n^{(2)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \tag{77}$$

右辺第二項を次のように展開する：

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle &= \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{1}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \\
&= \langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}\hat{Q}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\sum_{m\neq n}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}E_n^{(1)}\delta_{\gamma,\beta}\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= E_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned} \tag{78}$$

したがって，E_n^1 が重解のとき，

$$E_n^{(2)}\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{79}$$

ここで，係数 $C_{\gamma,\beta}^{*}$ をかけて，γ について和をとると，

$$E_n^{(2)}\sum_{\gamma}C_{\gamma,\beta}^{*}\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\sum_{\gamma}C_{\gamma,\beta}^{*}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}$$

$$E_n^{(2)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{80}$$

となる．したがって，

$$E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{81}$$

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{82}$$

を得る．これが，1 次で縮退が解けなかった場合における，縮退のある場合のエネルギーの 2 次の補正項である．

6.7

(74) の解に重根がなく，第 2 次近似で状態 $|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle$ のすべての縮退がとけたたきの第 3 次近似のエネルギー補正項について計算する．まず (32) へ，状態ベクトル $\langle\varphi_m^{(0)}|$ をかけると，

$$(\epsilon_n-\epsilon_m)\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle=\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_n^{(1)}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_n^{(2)}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle \tag{83}$$

ここで，右辺第 3 項は

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle=\sum_{\beta}C_{\beta,\alpha}\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle=0 \tag{84}$$

となり，$\epsilon_n\neq\epsilon_m$ であるから，

$$(\epsilon_n-\epsilon_m)\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle=\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_n^{(1)}\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)} \tag{85}$$

ここで，右辺を次のように展開すると

$$\begin{aligned}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle&=\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}\hat{1}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle\\&=\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle\\&=\sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\sum_{p\neq n}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\langle\varphi_p^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle\end{aligned} \tag{86}$$

ここで，

$$\tilde{C}_{p,\alpha}^{(1)}=\langle\varphi_p^{(0)}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle=\frac{\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_p)} \tag{87}$$

を使うと，

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle=\sum_{\beta=1}^{N}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle+\sum_{p\neq n}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_p)} \tag{88}$$

となる．したがって，

$$\begin{aligned}\tilde{C}_{m,\alpha}^{(2)}&=\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle\\&=\sum_{\beta=1}^{N}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}+\sum_{p\neq n}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}-E_n^{(1)}\frac{\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)}}{(\epsilon_n-\epsilon_p)}\end{aligned} \tag{89}$$

を得る．

6.8 固有状態について

ここでは (??) が成立するときの固有状態を第 2 近似で求める．(33) に左から $\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|$, $(\beta\neq\alpha)$，をかけると

$$\begin{aligned}(\epsilon_n-\epsilon_n)\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(3)};\alpha\rangle&=\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle-E_{n,\alpha}^{(1)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle\\&\quad-E_{n,\alpha}^{(2)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle-E_{n,\alpha}^{(3)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle\end{aligned} \tag{90}$$

ここで，第 4 項もまた $\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle = 0$ となるから

$$E_{n,\alpha}^{(2)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle - E_{n,\alpha}^{(1)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \tag{91}$$

$$E_{n,\alpha}^{(2)}C_{\beta,\alpha}^{(1)} = \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle - E_{n,\alpha}^{(1)}C_{\beta,\alpha}^{(2)} \tag{92}$$

ここで右辺第一項に，完全性関係 $\hat{1} = \hat{P} + \hat{Q}$ を代入すると，

$$\begin{aligned}
\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle &= \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}\hat{1}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}\hat{P}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle + \langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}\hat{Q}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= \sum_{\gamma=1}^{N}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\gamma\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle + \sum_{m\neq n}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= \sum_{\gamma=1}^{N}E_{n,\beta}^{(1)}\delta_{\beta,\gamma}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle + \sum_{m}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= E_{n,\gamma}^{(1)}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle + \sum_{m}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= E_{n,\gamma}^{(1)}C_{\gamma,\alpha}^{(2)} + \sum_{m}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\tilde{C}_{m,\alpha}^{(2)}
\end{aligned} \tag{93}$$

となる．$E_n^{(1)} = 0$ を仮定すると

$$E_{n,\alpha}^{(2)}C_{\beta,\alpha}^{(1)} = \sum_{m}\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\tilde{C}_{m,\alpha}^{(2)} \tag{94}$$

を得る．上式に

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_{m,\alpha}^{(2)} &= \langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)};\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi_n^{(0)};\beta|\varphi_n^{(1)};\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} + \sum_{p\neq n}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} - E_n^{(1)}\frac{\tilde{C}_{m,\alpha}^{(1)}}{(\epsilon_n-\epsilon_p)}
\end{aligned} \tag{95}$$

を代入すると

$$
\begin{aligned}
E^{(2)}_{n,\alpha} C^{(1)}_{\beta,\alpha} &= \sum_{m\neq n} \langle\langle \varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle \\
&\qquad \times \left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\langle \varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} + \sum_{p\neq n} \frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} - E^{(1)}_n \frac{\tilde{C}^{(1)}_{m,\alpha}}{(\epsilon_n-\epsilon_p)} \right] \\
&= \sum_{m\neq n} \left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \right. \\
&\qquad + \sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
&\qquad \left. - E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \right]
\end{aligned} \tag{96}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{m\neq n} \left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \right. \\
&\qquad \left. + \sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \right] \\
&\qquad - E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \Bigg]
\end{aligned} \tag{97}
$$

ここで，右辺第一項は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m\neq n}\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= \sum_{\beta=1}^{N} \sum_{m\neq n} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta=1}^{N} E^{(2)}_{n,\gamma}\delta_{\gamma,\beta}\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle \\
&= E^{(2)}_{n,\beta}\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_n;\alpha\rangle = E^{(2)}_{n,\beta} C^{(1)}_{\beta,\alpha}
\end{aligned} \tag{98}
$$

となるから，

$$E^{(2)}_{n,\alpha}C^{(1)}_{\beta,\alpha} = E^{(2)}_{n,\beta}C^{(1)}_{\beta,\alpha} + \sum_{m\neq n}\left[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}\right.$$

$$\left. - E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]$$

$$\therefore (E^{(2)}_{n,\alpha}-E^{(2)}_{n,\beta})C^{(1)}_{\beta,\alpha} = \sum_{m\neq n}\left[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}\right.$$

$$\left. - E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right] \tag{99}$$

したがって，

$$C^{(1)}_{\beta,\alpha} = \frac{1}{(E^{(2)}_{n,\alpha}-E^{(2)}_{n,\beta})}\sum_{m\neq n}\left[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}\right.$$

$$\left. - E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right] \tag{100}$$

よって，固有状態の 1 次補正は

$$|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle = \hat{P}\,|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle + \hat{Q}\,|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\beta=1}^{N}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle + \sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\beta\neq\alpha}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\beta|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle + \sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\beta\neq\alpha}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle C^{(1)}_{\beta,\alpha} + \sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\beta\neq\alpha}|\varphi^{(0)}_n;\beta\rangle\rangle\frac{1}{(E^{(2)}_{n,\alpha}-E^{(2)}_{n,\beta})}\sum_{m\neq n}\left[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}\right.$$

$$\left. -E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]$$

$$+ \sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{101}$$

以上の結果をまとめると，λ の 1 次近似で固有状態 $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,\alpha}\rangle &= |\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle + \lambda\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle && (102)\\
&= |\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle + \lambda \sum_{\beta\neq\alpha} |\varphi_n^{(0)};\beta\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,\alpha}^{(2)} - E_{n,\beta}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\left[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)}\right.\\
&\qquad \left. -E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]\\
&\qquad + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle\,\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\alpha\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} && (103)
\end{aligned}
$$

で与えられる．

7 縮退のない場合

7.1 1 次摂動

■固有エネルギーの 1 次摂動

はじめに固有エネルギーの 1 次摂動 $E_n^{(1)}$ を求める．(31) を次のように整理する：

$$
(E_n^{(1)} - \hat{V})\,|\varphi_n^{(0)}\rangle = (\hat{H}_0 - \epsilon_n)\,|\varphi_n^{(1)}\rangle \tag{104}
$$

(104) の両辺に左から，$\langle\varphi_n^{(0)}|$ をかけると，

$$
\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\hat{H}_0 - \epsilon_n) \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{105}
$$

となる．ここで，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ を正規直交完全系 $\left\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\right\}_{n=1,2,3,\cdots}$ で展開すると

$$
|\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_m\,|\varphi_m^{(0)}\rangle\,,\qquad C_m = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{106}
$$

と展開できる．(106) を (105) へ代入すると

$$
\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\hat{H}_0 - \epsilon_n) \middle| C_m \varphi_m^{(0)} \right\rangle \tag{107}
$$

となる．このとき，(107) の左辺は，

$$
\begin{aligned}
\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle &= \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle - \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle\\
&= E_n^{(1)} - \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle && (108)
\end{aligned}
$$

となる．また，(107) の右辺は $\hat{H}_0 \left|\varphi_m^{(0)}\right\rangle = \epsilon_m \left|\varphi_m^{(0)}\right\rangle$ より，

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{\infty} \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\hat{H}_0 - \epsilon_n) \middle| C_m \varphi_m^{(0)} \right\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\epsilon_m - \epsilon_n) C_m \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) C_m \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) C_m \delta_{n,m} \end{aligned} \tag{109}$$

となる．ここで $\delta_{n,m}$ はクロネッカーのデルタである．(109) の右辺に対して，m で和をとると，$m \neq n$ の項では $\delta_{n,m} = 0$ に，$m = n$ の項では $(\epsilon_m - \epsilon_n) = 0$ となる．したがって，(109) は恒等的に 0 となることがわかる．

$$\therefore \sum_{m=1}^{\infty} \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\hat{H}_0 - \epsilon_n) \middle| C_m \varphi_m^{(0)} \right\rangle = 0 \tag{110}$$

よって，(107) は

$$\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = 0 \tag{111}$$

となる．したがって，固有エネルギーの 1 次の摂動は

$$E_n^{(1)} = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle \tag{112}$$

と求まる．すでにわかっている固有状態 $\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle$ に対する摂動 $\hat{V}$ の期待値を求めることで $E_n^{(1)}$ を求めることができる．これは，極めて重要なことである．$\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle$ にとって，摂動 $\hat{V}$ の影響はどれくらいか，(112) を用いて，調べることができるのである．まとめると，固有エネルギーの 1 次の近似は

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} = \epsilon_n + \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \lambda \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle \tag{113}$$

で与えられる．

■固有状態の 1 次摂動

次に固有状態の 1 次摂動 $\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle$ を求める．(104) の両辺に左から，$\left\langle\varphi_m^{(0)}\right|$ をかけると，

$$\begin{aligned}\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle &= \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\hat{H}_0 - \epsilon_n) \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \\ &= \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_0 \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle - \epsilon_n \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \end{aligned} \tag{114}$$

となる．(114) の右辺第 1 項について，共役をとり，$\hat{H}_0$ のエルミート性 $\hat{H}_0^\dagger = \hat{H}_0$ を用いると

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_0 \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle^* = \left\langle \varphi_n^{(1)} \middle| \hat{H}_0{}^\dagger \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle = \left\langle \varphi_n^{(1)} \middle| \hat{H}_0 \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle = \epsilon_m \left\langle \varphi_n^{(1)} \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle \tag{115}$$

そして，もう一度上式に対して共役をとると，

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_0 \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = \epsilon_m^* \left\langle \varphi_n^{(1)} \middle| \varphi_m^{(0)} \right\rangle^* = \epsilon_m \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{116}$$

となる．よって，(114) は

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = (\epsilon_m - \epsilon_n) \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{117}$$

となる．ここで再び，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ を正規直交完全系 $\left\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\right\}_{n=1,2,3,\cdots}$ で展開し，

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_k |\varphi_k^{(0)}\rangle, \quad C_k = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{118}$$

(118) を (117) へ代入すると

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| C_k \varphi_k^{(0)} \right\rangle \tag{119}$$

となる．このとき，(119) の左辺は，

$$\begin{aligned}
\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (E_n^{(1)} - \hat{V}) \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle &= \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle - \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle \\
&= E_n^{(1)} \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle - \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle \\
&= - \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle
\end{aligned} \tag{120}$$

となる．最後の等式で，$\langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_n^{(0)} \rangle = 0$ を用いた．また，(119) の右辺は $\hat{H}_0 |\varphi_m^{(0)}\rangle = \epsilon_m |\varphi_m^{(0)}\rangle$ より，

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| C_k \varphi_k^{(0)} \right\rangle &= \sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) C_k \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_k^{(0)} \right\rangle \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) C_k \delta_{m,k}
\end{aligned} \tag{121}$$

となる．ここで $\delta_{m,k}$ はクロネッカーのデルタである．(121) の右辺に対して，k で和をとると，$k = m$ の項のみ残る．したがって，(109) は

$$\sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_m - \epsilon_n) \langle \varphi_m^{(0)} | C_k \varphi_k^{(0)} \rangle = (\epsilon_m - \epsilon_n) C_m \tag{122}$$

よって，(119) は

$$- \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = (\epsilon_m - \epsilon_n) C_m \tag{123}$$

となる．$m \neq n$ のとき，$(\epsilon_m - \epsilon_n) \neq 0$ であるから，展開係数 C_m は

$$C_m = \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{124}$$

と求まる．展開係数 (124) を用いて，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ を展開すれば，固有状態の 1 次摂動

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle \quad = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} C_m |\varphi_m^{(0)}\rangle = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} |\varphi_m^{(0)}\rangle \tag{125}$$

と求まる．ここで，$\displaystyle\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}$ は $m=n$ を除いて，m について和をとることを意味する．$m=n$ を除き和をとるという条件は展開係数 C_m を決めるときの $m\neq n$ からきている．まとめると，固有状態の 1 次の近似は

$$|\varphi_n\rangle \simeq |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty} \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\lambda\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle \tag{126}$$

で与えられる．

7.2　2 次摂動

■固有エネルギーの 2 次摂動

はじめに固有エネルギーの 2 次摂動 $E_n^{(1)}$ を求める．(32) を次のように整理する：

$$(\hat{V}-E_n^{(1)})\,|\varphi_n^{(1)}\rangle = (\epsilon_n-\hat{H}_0)\,|\varphi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(2)}\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{127}$$

(127) の両辺に左から，$\langle\varphi_n^{(0)}|$ をかけると，

$$\left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|(\hat{V}-E_n^{(1)})\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|(\epsilon_n-\hat{H}_0)\middle|\varphi_n^{(2)}\right\rangle + E_n^{(2)} \tag{128}$$

となる．このとき，(128) の左辺は，

$$\left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|(\hat{V}-E_n^{(1)})\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle - \left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|E_n^{(1)}\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle \tag{129}$$

となる．(129) の第 1 項に (125) を代入すると

$$\begin{aligned}\left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle &= \langle\varphi_n^{(0)}|\,\hat{V}\left(\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle\right)\\ &= \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_n^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\end{aligned} \tag{130}$$

また，(129) の第 2 項に (125) を代入すると

$$\begin{aligned}\left\langle\varphi_n^{(0)}\middle|E_n^{(1)}\middle|\varphi_n^{(1)}\right\rangle &= E_n^{(1)}\,\langle\varphi_n^{(0)}|\left(\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle\right)\\ &= E_n^{(1)}\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_m^{(0)}\rangle\\ &= E_n^{(1)}\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\delta_{n,m}\end{aligned} \tag{131}$$

となる．最後の項で $m = n$ は除いて m について和をとれば，$\delta_{n,m} = 0$ となるから，結局

$$\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = 0 \tag{132}$$

である．

次に，(128) の右辺を計算する．$|\varphi_n^{(2)}\rangle$ を正規直交完全系 $\left\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\right\}_{n=1,2,3,\cdots}$ を用いて展開する．

$$|\varphi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C'_k |\varphi_k^{(0)}\rangle, \qquad C'_k = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle \tag{133}$$

(133) を (128) の右辺第 1 項へ代入すると

$$\begin{aligned}
\left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle &= \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| C'_k \varphi_k^{(0)} \right\rangle \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_n - \epsilon_k) C'_k \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_k^{(0)} \right\rangle \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} (\epsilon_n - \epsilon_k) C'_k \delta_{n,k} = 0
\end{aligned} \tag{134}$$

となる．(130)，(132)，(134) より，固有エネルギーの 2 次の摂動は

$$E_n^{(2)} = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{135}$$

と求まる．まとめると，固有エネルギーの 2 次の近似は

$$\begin{aligned}
E_n &\simeq E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} \\
&= \epsilon_n + \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \lambda \hat{V} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda^2 \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)}
\end{aligned} \tag{136}$$

で与えられる．

■固有状態の 2 次摂動

次に固有状態の 2 次摂動 $|\varphi_n^{(2)}\rangle$ を求める．(127) の両辺に左から，$\langle \varphi_m^{(0)}|$ をかけると，

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\hat{V} - E_n^{(1)}) \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle \tag{137}$$

となる．このとき，(137) の左辺は，

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\hat{V} - E_n^{(1)}) \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle - \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle \tag{138}$$

となる．(138) の第 1 項に (125) を代入すると（ただし，和をとる記号は $m \to k$ と変える.）

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} \left(\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_k^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_k)} | \varphi_k^{(0)} \rangle \right)$$

$$= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_k^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_k^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_k)} \tag{139}$$

また，(138) の第 2 項に (125) を代入すると，

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(1)} \langle \varphi_m^{(0)} | \left(\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_k^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_k)} | \varphi_k^{(0)} \rangle \right)$$

$$= E_n^{(1)} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_k^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_k)} \langle \varphi_m^{(0)} | \varphi_k^{(0)} \rangle$$

$$= E_n^{(1)} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_k^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_k)} \delta_{m,k} = E_n^{(1)} \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)}$$

$$= \frac{\langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle \langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{140}$$

となる．最後の等式で $E_n^{(1)}$ へ (112) を代入した．

次に，(137) の右辺を計算する．$|\varphi_n^{(2)}\rangle$ を正規直交完全系 $\left\{ |\varphi_n^{(0)}\rangle \right\}_{n=1,2,3,\cdots}$ を用いて展開する．

$$|\varphi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_l' |\varphi_l^{(0)}\rangle, \quad C_l' = \left\langle \varphi_n^{(0)} \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle \tag{141}$$

(141) を (137) の右辺第 1 項へ代入すると

$$\left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| \varphi_n^{(2)} \right\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| (\epsilon_n - \hat{H}_0) \middle| C_l' \varphi_l^{(0)} \right\rangle$$

$$= \sum_{l=1}^{\infty} (\epsilon_n - \epsilon_l) C_l' \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_l^{(0)} \right\rangle$$

$$= \sum_{l=1}^{\infty} (\epsilon_n - \epsilon_l) C_l' \delta_{m,l} = (\epsilon_n - \epsilon_m) C_m' \tag{142}$$

となる．そして，(137) 右辺第 2 項に (135) を代入すると，

$$E_n^{(2)} \left\langle \varphi_m^{(0)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \varphi_m^{(0)} | \hat{V} | \varphi_n^{(0)} \rangle \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{V} | \varphi_m^{(0)} \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \delta_{m,n} = 0 \tag{143}$$

となる．最後の項では，$m=n$ を除いて，m で和をとったとき，$\delta_{m,n}=0$ となることを用いた．(139),(140)，(142)，(143) より，(137) は

$$\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_k^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)}\right)-\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}=(\epsilon_n-\epsilon_m)C'_m \tag{144}$$

となる．$m\neq n$ のとき，$(\epsilon_m-\epsilon_n)\neq 0$ であるから，展開係数 C_m は

$$C'_m=\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_k^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)(\epsilon_n-\epsilon_m)}\right)-\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \tag{145}$$

と求まる．展開係数 (145) を用いて，$|\varphi_n^{(2)}\rangle$ を展開すれば，固有状態の 2 次摂動

$$\begin{aligned}|\varphi_n^{(2)}\rangle &= \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}C'_m\,|\varphi_m^{(0)}\rangle\\ &=\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\left[\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_k^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)(\epsilon_n-\epsilon_m)}\right)-\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]|\varphi_m^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{146}$$

と求まる．まとめると，固有状態の 2 次の近似は

$$\begin{aligned}|\varphi_n\rangle &\simeq |\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle\\ &=|\varphi_n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\lambda\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle\\ &+\lambda^2\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\left[\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_k^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)(\epsilon_n-\epsilon_m)}\right)-\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]|\varphi_m^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{147}$$

で与えられる．

7.3 摂動論が有効なための条件

摂動論が有効なためには，摂動によって生まれる補正が小さいものでなければならない．その場合には，1 次の摂動論の計算で十分である．しかし，固有エネルギー，または固有状態の 1 次の摂動を計算したときに，たまたま 0 となったときには，2 次の摂動を計算する必要がある．

状態 $|\varphi_n\rangle$ の 1 次の摂動が小さいための条件は，(125) から，

$$\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\ll 1$$

$$\therefore\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\ll(\epsilon_n-\epsilon_m) \tag{148}$$

がすべての $m\neq n$ に対して成り立つことである．つまり，摂動 $\hat{V}$ の行列要素 $\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle$ に比べて，非摂動固有エネルギーの準位の差が十分大きくなければならない．

第 III 部

KPO に対する摂動論 version1

ここでは，基底状態と第 8 励起状態が縮退する場合の KPO の有効モデルを用いる．その Hamiltonian の基底状態を縮退のある時間に依存しない摂動論を用いて，解析的に計算する．

8　$n = 0$ と 8 が縮退する場合

8.1　有効モデルの定義

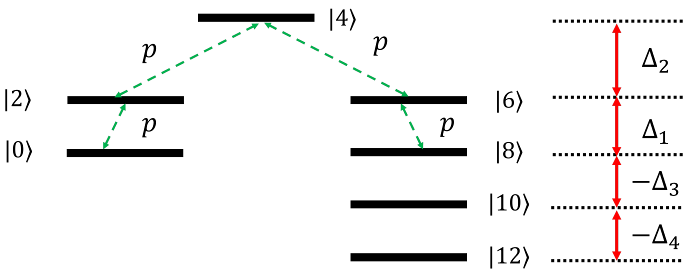

図 6　有効模型の概念図

$$
\hat{H}^{\mathrm{eff}}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
E_0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 & E_2 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 & E_4 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 & E_6 & p_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 & E_8 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & E_{10} & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & E_{12}
\end{pmatrix} \end{array}
= \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 & \Delta_1 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 & \Delta_2 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 & \Delta_1 & p_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & -\Delta_3 & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & -\Delta_4
\end{pmatrix} \end{array}
$$

$$
= \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{149}
$$

ここで，この有効模型の非摂動 Hamiltonian $\hat{H}_0^{\mathrm{eff}}$ と摂動 Hamiltonian $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ はそれぞれ以下のように与える：

$$
\hat{H}_0^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} &
\begin{pmatrix}
0 & p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p & \Delta_1 & p & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p & \Delta_2 & p & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p & \Delta_1 & p & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_3 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_4
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

$$
\hat{V}^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} &
\begin{pmatrix}
0 & p_1 - p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 - p & 0 & p_2 - p & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 - p & 0 & p_3 - p & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 - p & 0 & p_4 - p & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 - p & 0 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0
\end{pmatrix}
\end{array} \tag{150}
$$

$$
= \begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} &
\begin{pmatrix}
0 & \sqrt{2\cdot 1}p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\sqrt{2\cdot 1}p & 0 & \sqrt{4\cdot 3}p & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{4\cdot 3}p & 0 & \sqrt{6\cdot 5}p & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}p & 0 & \sqrt{8\cdot 7}p & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}p & 0 & \sqrt{10\cdot 9}p & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10\cdot 9}p & 0 & \sqrt{12\cdot 11}p \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{12\cdot 11}p & 0
\end{pmatrix}
\end{array} \tag{151}
$$

ここで，$p_1 = \sqrt{2\cdot 1}p$, $p_2 = \sqrt{4\cdot 3}p$, $p_3 = \sqrt{6\cdot 5}p$, $p_4 = \sqrt{8\cdot 7}p$, $p_5 = \sqrt{10\cdot 9}p$, $p_6 = \sqrt{12\cdot 11}p$ である．

8.2

次に，この有効模型の非摂動 Hamiltonian $\hat{H}_0^{\mathrm{eff}}$ に注目する．この Hamiltonian $\hat{H}_0^{\mathrm{eff}}$ は Block 対角化されており，$\{|0\rangle, |2\rangle, |4\rangle, |6\rangle, |8\rangle\}$ と $|10\rangle, |12\rangle$ で張られる部分空間に分けることができ， Hamiltonian は以下のように書き直すことができる：

$$
\hat{H}_0^{\mathrm{eff}} = \hat{H}_0^{0\to 8} \bigoplus \hat{H}_0^{10,12} \tag{152}
$$

ここで，

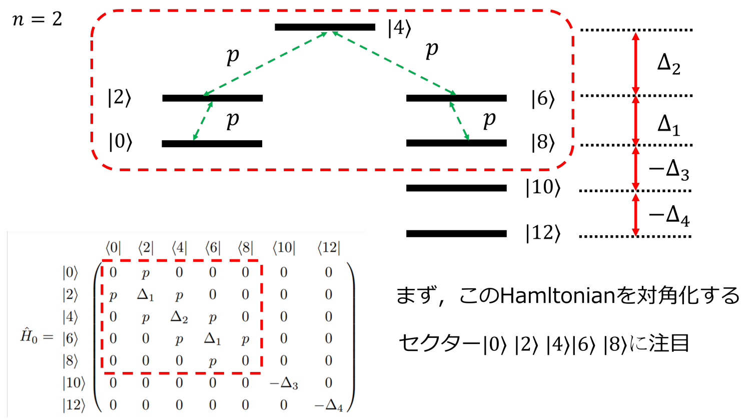

図 7　有効模型の概念図

$$
\hat{H}_0^{0\to 8} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\
\begin{pmatrix} 0 & p & 0 & 0 & 0 \\ p & \Delta_1 & p & 0 & 0 \\ 0 & p & \Delta_2 & p & 0 \\ 0 & 0 & p & \Delta_1 & p \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{153}
$$

$$
\hat{H}_0^{10,12} = \begin{array}{c} \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix} -\Delta_3 & 0 \\ 0 & -\Delta_4 \end{pmatrix} \end{array} \tag{154}
$$

である．Hamiltonian $\hat{H}_0^{0\to 8}$ を対角化する．

これを実行するために，まず，$\{|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle\}$ で張られる部分空間を考え，その空間における Hamiltonian $\hat{H}^{2,4,6}$ を以下のように定義する：

$$
\hat{H}^{2,4,6} = \begin{array}{c} \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| \end{array} \\
\begin{pmatrix} \Delta_1 & p & 0 \\ p & \Delta_2 & p \\ 0 & p & \Delta_1 \end{pmatrix} \end{array} \tag{155}
$$

ここで，$\Delta_1 > \Delta_2$ を仮定する．この Hamiltonian を対角化し，エネルギー固有値とエネルギー固有状態を求

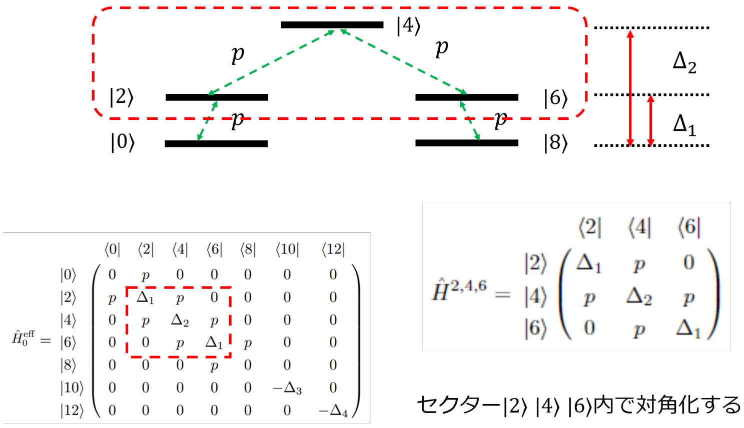

図 8　有効模型の概念図

めると以下のように得られる：

$$E_{D_{2,6}} = \Delta_1 \tag{156}$$

$$\begin{aligned} E_{B_{2,6}} &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{\Delta_1^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2^2 + 8p^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{(\Delta_2 - \Delta_1)^2 + 8p^2}\right) \end{aligned} \tag{157}$$

$$\begin{aligned} E_4 =& \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{\Delta_1^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2^2 + 8p^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_2 - \Delta_1)^2 + 8p^2}\right) \end{aligned} \tag{158}$$

ここで，$E_{D_{2,6}} > E_{B_{2,6}} > E_4$ である．固有状態は $|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle$ の基底で展開すれば以下のように得られる：

$$|\psi_D\rangle = C_0\left\{-1, 0, 1\right\} \tag{159}$$

$$\begin{aligned} |\psi_B\rangle &= C_1\left\{1, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + \sqrt{\Delta_1^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2^2 + 8p^2}}{2p}, 1\right\} \\ &= C_1\left\{1, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 8p^2}}{2p}, 1\right\} \\ &= C_1\left\{1, \epsilon_+(\Delta_1, \Delta_2, p), 1\right\} \end{aligned} \tag{160}$$

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &= C_2\left\{1, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 - \sqrt{\Delta_1^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2^2 + 8p^2}}{2p}, 1\right\} \\ &= C_2\left\{1, \epsilon_-(\Delta_1, \Delta_2, p), 1\right\} \end{aligned} \tag{161}$$

$$\epsilon_{\pm}(\Delta_1, \Delta_2, p) = -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 \pm \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 8p^2}}{2p} \tag{162}$$

規格化すると，

$$|D\rangle \equiv |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \\ 0 \\ \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{163}$$

$$|4\rangle \equiv |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \\ \\ -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + \sqrt{\Delta_1{}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2{}^2 + 8p^2}}{2p_2\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \\ \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \\ \\ \frac{\epsilon_+}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \\ \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+2}} \end{pmatrix} \tag{164}$$

$$|B\rangle \equiv |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \\ \\ -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 - \sqrt{\Delta_1{}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2{}^2 + 8p^2}}{2p_2\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \\ \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \\ \\ \frac{\epsilon_-}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \\ \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+2}} \end{pmatrix} \tag{165}$$

を得る．$\Delta_1 < \Delta_2$ の場合は，$|B\rangle$ と $|4\rangle$ の正負が入れ替わることに注意．パラメトリックドライブの振幅が十分小さいことを仮定すれば，固有状態として，

$$|D_{2,6}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|2\rangle + |6\rangle) \tag{166}$$

$$|B_{2,6}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |6\rangle) \tag{167}$$

を定義できる．

8.3

部分空間 $\{|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle\}$ 内で，対角化することができたため，これで，$|2\rangle$ と $|6\rangle$ の縮退を解くことができた．したがって，次に，Hamiltonian $\hat{H}_0^{0\to 8}$ に対して，縮退する摂動論を適用し，そのエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態を求めていくことにする．

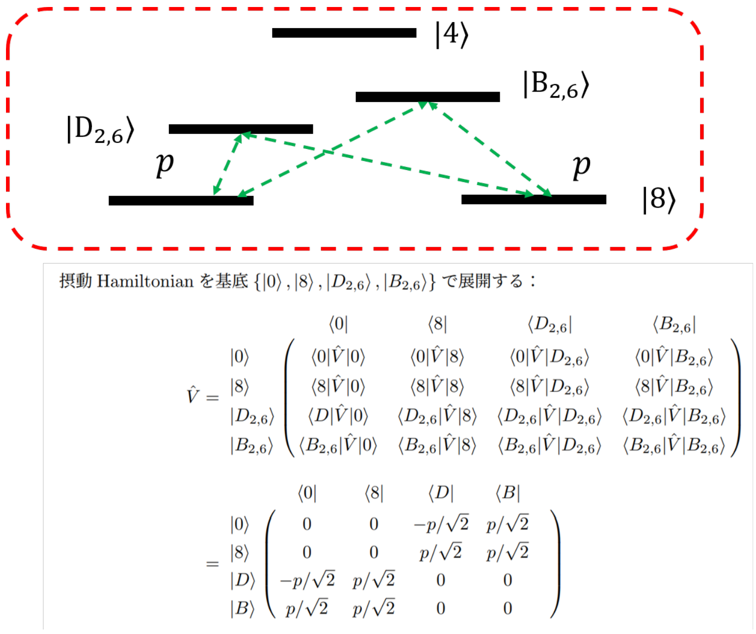

図 9　有効模型の概念図

そのために，まず，摂動 Hamiltonian を基底 $\{|0\rangle, |8\rangle, |D_{2,6}\rangle, |B_{2,6}\rangle\}$ で展開する：

$$\hat{V} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |8\rangle \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 8| & \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| \end{array} \\ \begin{pmatrix} \langle 0|\hat{V}|0\rangle & \langle 0|\hat{V}|8\rangle & \langle 0|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 0|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ \langle 8|\hat{V}|0\rangle & \langle 8|\hat{V}|8\rangle & \langle 8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ \langle D|\hat{V}|0\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ \langle B_{2,6}|\hat{V}|0\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \end{pmatrix} \end{array} \tag{168}$$

$$= \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |8\rangle \\ |D\rangle \\ |B\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 8| & \langle D| & \langle B| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -p/\sqrt{2} & p/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & p/\sqrt{2} & p/\sqrt{2} \\ -p/\sqrt{2} & p/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ p/\sqrt{2} & p/\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{169}$$

$$\langle 0|\hat{V}|D\rangle = \langle D|\hat{V}|0\rangle = -p/\sqrt{2} \tag{170}$$

$$\langle 0|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|0\rangle = p/\sqrt{2} \tag{171}$$

$$\langle 8|\hat{V}|D\rangle = \langle D|\hat{V}|8\rangle = p/\sqrt{2} \tag{172}$$

$$\langle 8|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|8\rangle = p/\sqrt{2} \tag{173}$$

STEP1：固有状態の 1 次摂動を計算する

この摂動 Hamiltonian に従って，摂動論を適用していく．まず，固有状態の 1 次摂動を計算する：

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = \sum_{\gamma\neq 0} |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n} \Bigg[\sum_{p\neq n} & \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle \langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
& -E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \Bigg] \\
& + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n} \Bigg[\sum_{p\neq n} & \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle \langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
& -E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \Bigg] \\
& + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n} \Bigg[& \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_D)} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_B)} \\
& -E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle \langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2} \Bigg] \\
& + \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned}
\tag{174}
$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi^{(1)}_{n,0}\rangle = |\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle \frac{1}{(E^{(2)}_{n,0}-E^{(2)}_{n,8})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle \langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle \langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_D)(\epsilon_n-\epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle \langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle \langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_D)(\epsilon_n-\epsilon_B)} \\
-E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle \langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_D)^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle \langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle \langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_B)(\epsilon_n-\epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle \langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle \langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_B)(\epsilon_n-\epsilon_B)} \\
-E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle \langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_B)^2} \Bigg\}\Bigg] \\
+ |\varphi^{(0)}_D\rangle \frac{\langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_D)} + |\varphi^{(0)}_B\rangle \frac{\langle\varphi^{(0)}_B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_B)} \qquad (175)
\end{aligned}
$$

$|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle = C_{0,0}\,|0\rangle + C_{8,0}\,|8\rangle$, $|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle = C_{0,8}\,|0\rangle + C_{8,8}\,|8\rangle$, $|\varphi^{(0)}_D\rangle = |D\rangle$, $|\varphi^{(0)}_B\rangle = |B\rangle$ であるから,

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)} - E_{n,8}^{(2)})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_B)} \\
-E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_B)} \\
-E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)} + |B\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)}
\end{aligned} \tag{176}
$$

ここで,

$$
\langle D|\hat{V}|D\rangle = \langle B|\hat{V}|B\rangle = \langle D|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|D\rangle = 0 \tag{177}
$$

$$
E_n^{(1)} = 0 \tag{178}
$$

$$
\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0} \langle D|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0} \langle D|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,0}(p/\sqrt{2}) \tag{179}
$$

$$
\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0} \langle B|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0} \langle B|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(p/\sqrt{2}) + C_{8,0}(p/\sqrt{2}) \tag{180}
$$

であるから,

$$
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_D)} + |B\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_B)} \tag{181}
$$

$$
\begin{aligned}
= |D\rangle \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_D)} \Big\{ C_{0,0}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,0}(p/\sqrt{2}) \Big\} \\
+ |B\rangle \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_B)} \Big\{ C_{0,0}(p/\sqrt{2}) + C_{8,0}(p/\sqrt{2}) \Big\}
\end{aligned} \tag{182}
$$

永年方程式を解き，2 次の補正項と規格化定数を求める

永年方程式

$$\sum_{\beta=1}^{N}\left[E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\right]C_{\beta,\alpha}=0, \tag{183}$$

ここで，

$$(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\equiv\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{184}$$

を解き，エネルギー固有値の 2 次の補正項 $E_{n,0}^{(2)}$, $E_{n,8}^{(2)}$ と固有状態の第ゼロ近似に関する展開係数，$C_{0,0}$, $C_{8,0}$, $C_{0,8}$, $C_{8,8}$ を求める．

まず，非摂動ハミルトニアンのエネルギー固有値のうち，縮退していない状態のエネルギー固有値は以下のように与えられる：

$$\epsilon_D=\Delta_1 \tag{185}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_B&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\sqrt{{\Delta_1}^2-2\Delta_1\Delta_2+{\Delta_2}^2+8p^2}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+8p^2}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\epsilon\right)\end{aligned} \tag{186}$$

ここで，

$$\epsilon\equiv\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+8p^2}=(\Delta_1-\Delta_2)\sqrt{1+\frac{8p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)^2}}=(\Delta_1-\Delta_2)\sqrt{1+\delta_+}, \tag{187}$$

$$\delta_+\equiv\frac{8p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)^2} \tag{188}$$

とおいた．次の Taylor 展開の公式を

$$\sqrt{1+x}=1+\frac{x}{2}-\frac{x^2}{8}+\frac{x^3}{16}-\frac{5x^4}{128}+\frac{7x^5}{256}+O\left(x^6\right) \tag{189}$$

使うと，

$$\begin{aligned}\epsilon&\simeq(\Delta_1-\Delta_2)\sqrt{1+\delta_+}\\&=(\Delta_1-\Delta_2)\left(1+\frac{1}{2}\delta_+\right)=(\Delta_1-\Delta_2)\left(1+\frac{4p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)^2}\right)\\&=(\Delta_1-\Delta_2)+\frac{4p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)}\end{aligned} \tag{190}$$

となり，エネルギー固有値 ϵ_B は以下のようになる：

$$\epsilon_B \simeq \frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2+(\Delta_1-\Delta_2)+\frac{4p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)}\right)=\Delta_1+\frac{2p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)}=\Delta_1+\delta_0 \tag{191}$$

ここで,

$$\delta_0 \equiv \frac{2p^2}{(\Delta_1-\Delta_2)} \tag{192}$$

まず，2 次摂動に関する行列要素を計算する：

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,0}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|0\rangle}{(\epsilon_0-\epsilon_m)}=\frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_B)}+\frac{\langle 0|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_D)}$$

$$=\frac{|\langle 0|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_B)}+\frac{|\langle 0|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_D)}=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{1/2}{(-\epsilon_D)} \tag{193}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle 8|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(8)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_8-\epsilon_m)}=\frac{\langle 8|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_B)}+\frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_D)}$$

$$=\frac{|\langle 8|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_B)}+\frac{|\langle 8|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_D)}=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{1/2}{(-\epsilon_D)} \tag{194}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,8}=(\hat{V}^{(2)})_{8,0}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_0-\epsilon_m)}=\frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_B)}+\frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_D)}$$

$$=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{-1/2}{(-\epsilon_D)} \tag{195}$$

$\epsilon_B=\Delta_1+\delta_0$, $\epsilon_D=\Delta_1$ であるから,

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,0}=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{1/2}{(-\epsilon_D)}=\frac{1/2}{-\Delta_1-\delta_0}+\frac{1/2}{-\Delta_1}$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{-\Delta_1-\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\right)=\frac{1}{2}\left(\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\right) \tag{196}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8}=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{1/2}{(-\epsilon_D)}=\frac{1/2}{-\Delta_1-\delta_0}+\frac{1/2}{-\Delta_1}=\frac{1}{2}\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)} \tag{197}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,8}=\frac{1/2}{(-\epsilon_B)}+\frac{-1/2}{(-\epsilon_D)}=\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{-\Delta_1-\delta_0}-\frac{1}{-\Delta_1}\Big)$$

$$=\frac{1}{2}\Big(\frac{\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\Big)=\frac{\delta_0}{B} \tag{198}$$

$$E_n^{(2)} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} + (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \mp \sqrt{D}}{2}, \tag{199}$$

$$\begin{aligned} D &= [(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - \hat{V}^{(2)})_{8,8}]^2 + 4(\hat{V}^{(2)})_{0,8})^2 \\ &= 4\frac{1}{4}\Big(\frac{\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\Big)^2 = \frac{\delta_0^2}{\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}^2} \end{aligned} \tag{200}$$

よって，

$$E_n^{(2)} = \frac{\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)} \mp \frac{\delta_0}{\{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)\}}}{2} = \frac{(-2\Delta_1-\delta_0)\mp\delta_0}{2\{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)\}} = \frac{A}{B}[1\mp\delta_0/A] \tag{201}$$

ここで，

$$A \equiv (-2\Delta_1 + \delta_0) \tag{202}$$

$$B \equiv 2\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\} \tag{203}$$

$$\delta_0 = \frac{2p^2}{(\Delta_1 - \Delta_2)} \tag{204}$$

とおいた．

$E_n^{(2)} = E_{n,0}^{(2)}$ のとき，規格化定数の比は

$$\frac{C_{0,0}}{C_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - E_{n,0}^{(2)}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \pm \sqrt{D}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} \tag{205}$$

となるから，

$$\frac{C_{0,0}}{C_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - E_{n,0}^{(2)}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \pm \sqrt{D}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} \tag{206}$$

これより，$C_{0,0} = C_{0,8} = 1/\sqrt{2}$ を得る．すなわち，第 0 近似は

$$|\varphi_{n,0}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) \tag{207}$$

第 1 次近似は

$$|\varphi_{n,0}^1\rangle = |B\rangle\,\frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_B} \tag{208}$$

と求まるから，

$$|\varphi_{n,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) + |B\rangle\,\frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_B} \tag{209}$$

第 8 励起状態について，同様に計算を行う

第 8 励起状態については,

$$
\begin{aligned}
|\varphi^{(1)}_{n,8}\rangle = \sum_{\gamma\neq 8} |\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle \frac{1}{(E^{(2)}_{n,8}-E^{(2)}_{n,0})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;\gamma|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle \frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle \frac{1}{(E^{(2)}_{n,8}-E^{(2)}_{n,0})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_p\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_p|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle \frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle \frac{1}{(E^{(2)}_{n,8}-E^{(2)}_{n,0})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_D\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_D|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_D)} \\
+\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_B)} \\
-E^{(1)}_n \frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_m\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi^{(0)}_m\rangle \frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned}
\tag{210}
$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)} - E_{n,0}^{(2)})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_B)} \\
-E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_D^{(0)}\rangle \langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_B)} \\
-E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_B^{(0)}\rangle \langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ |\varphi_D^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_D^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)} + |\varphi_B^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_B^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)} \qquad (211)
\end{aligned}
$$

$|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,|0\rangle + C_{8,0}\,|8\rangle$, $|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8}\,|0\rangle + C_{8,8}\,|8\rangle$, $|\varphi_D^{(0)}\rangle = |D\rangle$, $|\varphi_B^{(0)}\rangle = |B\rangle$ であるから,

$$|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)} - E_{n,0}^{(2)})}$$

$$\times \left[\left\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \right.\right.$$

$$+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)(\epsilon_n - \epsilon_B)}$$

$$\left. -E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)^2} \right\}$$

$$+ \left\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|D\rangle \langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_D)} \right.$$

$$+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)(\epsilon_n - \epsilon_B)}$$

$$\left.\left. -E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle \langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)^2} \right\} \right]$$

$$+ |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_D)} + |B\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_B)} \tag{212}$$

ここで,

$$\langle D|\hat{V}|D\rangle = \langle B|\hat{V}|B\rangle = \langle D|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|D\rangle = 0 \tag{213}$$

$$E_n^{(1)} = 0 \tag{214}$$

$$\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8} \langle D|\hat{V}|0\rangle + C_{8,8} \langle D|\hat{V}|8\rangle = C_{0,8}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \tag{215}$$

$$\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8} \langle B|\hat{V}|0\rangle + C_{8,8} \langle B|\hat{V}|8\rangle = C_{0,8}(p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \tag{216}$$

であるから,

$$|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_8 - \epsilon_D)} + |B\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_8 - \epsilon_B)} \tag{217}$$

$$= |D\rangle \frac{1}{(\epsilon_8 - \epsilon_D)} \left\{ C_{0,8}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \right\}$$

$$+ |B\rangle \frac{1}{(\epsilon_8 - \epsilon_B)} \left\{ C_{0,8}(p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \right\} \tag{218}$$

$$|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |D\rangle\,\frac{p}{(\epsilon_8 - \epsilon_D)} \tag{219}$$

$$|\varphi_{n,8}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle + |8\rangle) + |D\rangle\,\frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_D} \tag{220}$$

8.4 縮退のない摂動論への移行

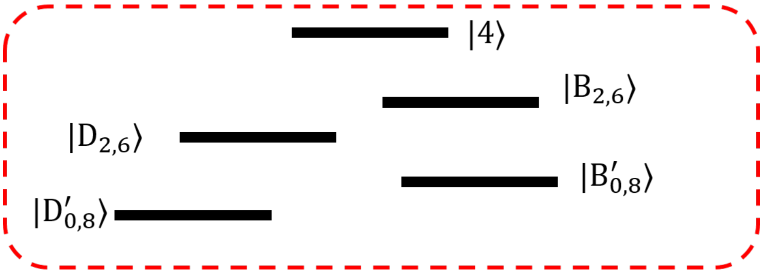

図 10　有効模型の概念図

上での摂動計算によって，摂動論により，補正された固有状態が次のように得られた：

$$|B'_{0,8}\rangle \equiv |\varphi_{n,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) + \delta_1\,|B_{2,6}\rangle\,, \tag{221}$$

$$\delta_1 \equiv \frac{p}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})} \tag{222}$$

$$|D'_{0,8}\rangle \equiv |\varphi_{n,8}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle + |8\rangle) + \delta_2\,|D_{2,6}\rangle\,, \tag{223}$$

$$\delta_2 \equiv \frac{p}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})} \tag{224}$$

これで，すべての状態について，縮退が解け，縮退のない摂動論を用いて，有効模型の Hamiltonian のエネルギー固有値，対応するエネルギー固有状態を求めることが可能となる．まず，有効模型の摂動 Hamiltonian

$$\hat{V}^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & p_1 - p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_1 - p & 0 & p_2 - p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 - p & 0 & p_3 - p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 - p & 0 & p_4 - p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 - p & 0 & p_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{225}$$

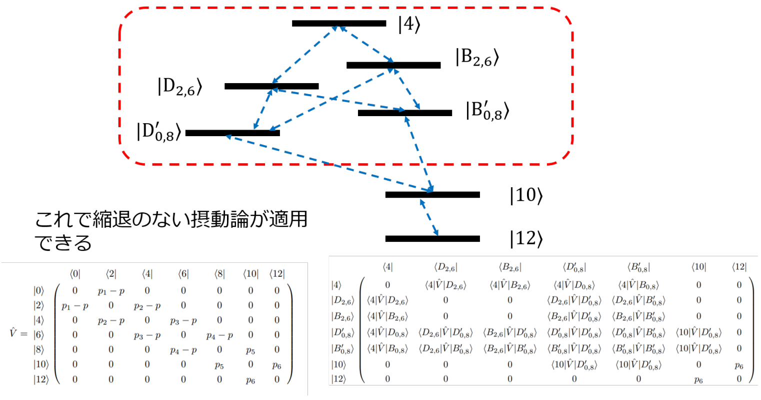

図 11　有効模型の概念図

を基底 $\{\langle 0|, \langle 2|, \langle 4|, \langle 6|, \langle 8|, \langle 10|, \langle 12|\}$ で $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ を表示すると,

$$
\hat{V}^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c} \\ |4\rangle \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \\ |D'_{0,8}\rangle \\ |B'_{0,8}\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 4| & \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| & \langle D'_{0,8}| & \langle B'_{0,8}| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & \langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle & \langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\
\langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & 0 & 0 & \langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\
\langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & 0 & 0 & \langle B_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\
\langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 \\
\langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle B'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 \\
0 & 0 & 0 & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{226}
$$

となる．行列要素が，0 となる場合だけ，あからさまに 0 と記述した．それ以外の，行列要素の具体的な値は,

以下のように求まる：

$$\langle 4|\hat{V}|4\rangle = 0 \tag{227}$$

$$\langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \langle D_{2,6}|\hat{V}|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\langle 4|\hat{V}|2\rangle + \langle 4|\hat{V}|6\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{-(p_2 - p) + (p_3 - p)\Big\} \tag{228}$$

$$\langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 4|\hat{V}|2\rangle + \langle 4|\hat{V}|6\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{(p_2 - p) + (p_3 - p)\Big\} \tag{229}$$

$$\begin{aligned}\langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle = \langle D_{0,8}|\hat{V}|4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\langle 4|\hat{V}|0\rangle + \langle 4|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2\langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0+0) + \frac{\delta_2}{\sqrt{2}}\Big\{-(p_2 - p) + (p_3 - p)\Big\} \end{aligned} \tag{230}$$

$$\begin{aligned}\langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle = \langle B_{0,8}|\hat{V}|4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 4|\hat{V}|0\rangle + \langle 4|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2\langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0+0) + \frac{\delta_1}{\sqrt{2}}\Big\{(p_2 - p) + (p_3 - p)\Big\} \end{aligned} \tag{231}$$

$$\tag{232}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|6\rangle - \langle 6|\hat{V}|2\rangle) = 0 \tag{233}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|6\rangle + \langle 6|\hat{V}|2\rangle) = 0 \tag{234}$$

$$\begin{aligned}\langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle = \langle D'_{0,8}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle &= \langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle + \delta_2\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2 \cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\} \end{aligned} \tag{235}$$

$$\begin{aligned}\langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle = \langle B'_{0,8}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle &= \langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle + \delta_1\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_1 \cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{-(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\} \end{aligned} \tag{236}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|6\rangle + \langle 6|\hat{V}|2\rangle) = 0 \tag{237}$$

$$\begin{aligned}\langle B_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle &= \langle D'_{0,8}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle + \delta_2\langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2 \cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{-(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\}\end{aligned} \tag{238}$$

$$\begin{aligned}\langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle &= \langle B'_{0,8}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle + \delta_1\langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_1 \cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\}\end{aligned} \tag{239}$$

a

$$\begin{aligned}\langle D'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle &= \Big(\langle D_{2,6}| + \delta_2\,\langle D_{0,8}|\Big)\hat{V}\Big(|D_{2,6}\rangle + \delta_2\,|D_{0,8}\rangle\Big) \\ &= \langle D_{0,8}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle + \delta_2^2\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle + 2\delta_2\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle \\ &= 2\delta_2\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle \\ &= 2\delta_2\frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) \\ &= \delta_2\Big\{(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\}\end{aligned} \tag{240}$$

$$\begin{aligned}\langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle &= \Big(\langle D_{2,6}| + \delta_2\,\langle D_{0,8}|\Big)\hat{V}\Big(|B_{2,6}\rangle + \delta_1\,|B_{0,8}\rangle\Big) \\ &= \langle D_{0,8}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle + \delta_1\delta_2\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle + (\delta_1 + \delta_2)\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle \\ &= (\delta_1 + \delta_2)\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle \\ &= (\delta_1 + \delta_2)\frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) \\ &= \frac{\delta_1 + \delta_2}{2}\Big\{-(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\}\end{aligned} \tag{241}$$

a

$$
\begin{aligned}
\langle B'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle &= \langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle \\
\langle B'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle &= \Big(\langle B_{2,6}| + \delta_1 \langle D_{0,8}|\Big)\hat{V}\Big(|B_{2,6}\rangle + \delta_1 |B_{0,8}\rangle\Big) \\
&= \langle B_{0,8}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle + \delta_1^2 \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle + 2\delta_1\langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle \\
&= 2\delta_1\langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle \\
&= 2\delta_1\frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) \\
&= \delta_1\Big\{(p_1 - p) + (p_4 - p)\Big\}
\end{aligned}
\tag{242}
$$

b

$$
\begin{aligned}
\langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle &= \langle 10|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle \\
&= \langle 10|\hat{V}|D_{0,8}\rangle + \delta_2 \langle 10|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 10|\hat{V}|8\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}p_5
\end{aligned}
\tag{243}
$$

次に縮退のない摂動論を実行するため，計算しやすいように，固有状態の第ゼロ近似それぞれに，次のようにラベルを付ける：

$$|\varphi_0^{(0)}\rangle \equiv |4\rangle \tag{244}$$

$$|\varphi_1^{(0)}\rangle \equiv |D_{2,6}\rangle \tag{245}$$

$$|\varphi_2^{(0)}\rangle \equiv |B_{2,6}\rangle \tag{246}$$

$$|\varphi_3^{(0)}\rangle \equiv |D'_{0,8}\rangle \tag{247}$$

$$|\varphi_4^{(0)}\rangle \equiv |B'_{0,8}\rangle \tag{248}$$

$$|\varphi_5^{(0)}\rangle \equiv |10\rangle \tag{249}$$

$$|\varphi_6^{(0)}\rangle \equiv |12\rangle \tag{250}$$

固有状態の 2 次の近似の公式は

$$
\begin{aligned}
|\varphi_n\rangle &\simeq |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda\,|\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|\varphi_n^{(2)}\rangle \\
&= |\varphi_n^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\lambda\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle \\
&+ \lambda^2 \sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{\infty} \left[\left(\sum_{\substack{k=1\\ k\neq n}}^{\infty} \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_k^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)(\epsilon_n-\epsilon_m)}\right) - \frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]|\varphi_m^{(0)}\rangle
\end{aligned}
\tag{251}
$$

で与えられる．これに，代入し，補正項を求めていくことにする：

$ith : 8, 0 : [[0.70710437 + 0.j]], 2 : [[0.00151543 + 0.j]], 4 : [[5.58643597e - 05 + 0.j]], 6 : [[0.00801705 + 0.j]], 8 : [[0.70703581 + 0.j]], 10 : [[-0.00609805 + 0.j]], 12 : [[2.65387791e - 05 + 0.j]]$

1 次の摂動

$$
\begin{aligned}
|\varphi_4^{(1)}\rangle &= \sum_{\substack{m=1\\ m\neq 4}}^{\infty} \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_m)}\,|\varphi_m^{(0)}\rangle \\
&= \frac{\langle\varphi_0^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_0)}\,|\varphi_0^{(0)}\rangle + \frac{\langle\varphi_1^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_1)}\,|\varphi_1^{(0)}\rangle + \frac{\langle\varphi_2^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_2)}\,|\varphi_2^{(0)}\rangle \\
&+ \frac{\langle\varphi_3^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_3)}\,|\varphi_3^{(0)}\rangle + \frac{\langle\varphi_5^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_5)}\,|\varphi_5^{(0)}\rangle + \frac{\langle\varphi_6^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_6)}\,|\varphi_6^{(0)}\rangle
\end{aligned}
\tag{252}
$$

$$
|\Psi_{4,i}^{(1)}\rangle \equiv \frac{\langle\varphi_i^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_i)}\,|\varphi_i^{(0)}\rangle \tag{253}
$$

$$
\begin{aligned}
|\Psi_{4,0}^{(1)}\rangle &= \frac{\langle\varphi_0^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_0)}\,|\varphi_0^{(0)}\rangle = \frac{\langle 4|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_4)}\,|4\rangle \\
&= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_4)}\frac{\delta_1}{\sqrt{2}}(p_2+p_3-2p)\,|4\rangle = \frac{p(p_2+p_3-2p)}{\sqrt{2}(E_{B'_{0,8}}-E_4)(E_0-E_{B_{2,6}})}\,|4\rangle
\end{aligned}
\tag{254}
$$

$$
\begin{aligned}
|\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle &= \frac{\langle\varphi_1^{(0)}|\hat{V}|\varphi_4^{(0)}\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_1)}\,|\varphi_1^{(0)}\rangle = \frac{\langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\,|D_{2,6}\rangle \\
&= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\frac{1}{2}(-p_1+p_4)\,|D_{2,6}\rangle = \frac{-p_1+p_4}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\,|D_{2,6}\rangle
\end{aligned}
\tag{255}
$$

$$|\Psi^{(1)}_{4,2}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_2|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_2)}\,|\varphi^{(0)}_2\rangle = \frac{\langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}\,|B_{2,6}\rangle$$

$$= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}\frac{1}{2}(p_1+p_4-2p)\,|B_{2,6}\rangle = \frac{(p_1+p_4-2p)}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}\,|B_{2,6}\rangle \tag{256}$$

$$|\Psi^{(1)}_{4,3}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_3|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_3)}\,|\varphi^{(0)}_3\rangle = \frac{\langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}\,|D'_{0,8}\rangle$$

$$= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}\frac{\delta_1+\delta_2}{2}(-p_1+p_4)\,|D'_{0,8}\rangle = \frac{(\delta_1+\delta_2)(-p_1+p_4)}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}\,|D'_{0,8}\rangle \tag{257}$$

$$|\Psi^{(1)}_{4,5}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_5|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_5)}\,|\varphi^{(0)}_5\rangle = \frac{\langle 10|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{10})}\,|10\rangle = \frac{p_5}{\sqrt{2}(E_{B'_{0,8}}-E_{10})}\,|10\rangle \tag{258}$$

$$|\Psi^{(1)}_{4,6}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_6|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_6)}\,|\varphi^{(0)}_6\rangle = \frac{\langle 12|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{12})}\,|12\rangle = 0\cdot|12\rangle \tag{259}$$

ここで，$p_1=\sqrt{2\cdot 1}p$, $p_2=\sqrt{4\cdot 3}p$, $p_3=\sqrt{6\cdot 5}p$, $p_4=\sqrt{8\cdot 7}p$, $p_5=\sqrt{10\cdot 9}p$, $p_6=\sqrt{12\cdot 11}p$ である．

2 次の摂動

$$|\varphi^{(2)}_n\rangle = \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\left[\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\langle\varphi^{(0)}_m|\,\hat{V}\,|\varphi^{(0)}_k\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_k|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_k)(\epsilon_n-\epsilon_m)}\right)-\frac{\langle\varphi^{(0)}_n|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_m|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\right]|\varphi^{(0)}_m\rangle \tag{260}$$

$$|\Psi^{(2)}_{4,i}\rangle \equiv \left[\left(\sum_{\substack{k=1\\k\neq 4}}^{\infty}\frac{\langle\varphi^{(0)}_i|\,\hat{V}\,|\varphi^{(0)}_k\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_k|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_k)(\epsilon_4-\epsilon_i)}\right)-\frac{\langle\varphi^{(0)}_4|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_i|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_i)^2}\right]|\varphi^{(0)}_i\rangle \tag{261}$$

$$|\Psi^{(2)}_{4,0}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_0|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_0)}\,|\varphi^{(0)}_0\rangle = \frac{\langle 4|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_4)}\,|4\rangle$$

$$= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_4)}\frac{\delta_1}{\sqrt{2}}(p_2+p_3-2p)\,|4\rangle = \frac{p(p_2+p_3-2p)}{\sqrt{2}(E_{B'_{0,8}}-E_4)(E_0-E_{B_{2,6}})}\,|4\rangle \tag{262}$$

$$|\Psi^{(1)}_{4,1}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_1|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_1)}\,|\varphi^{(0)}_1\rangle = \frac{\langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\,|D_{2,6}\rangle$$

$$= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\frac{1}{2}(-p_1+p_4)\,|D_{2,6}\rangle = \frac{-p_1+p_4}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{D_{2,6}})}\,|D_{2,6}\rangle \tag{263}$$

$$
\begin{aligned}
|\Psi^{(1)}_{4,2}\rangle &= \frac{\langle\varphi^{(0)}_2|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_2)}|\varphi^{(0)}_2\rangle = \frac{\langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}|B_{2,6}\rangle \\
&= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}\frac{1}{2}(p_1+p_4-2p)\,|B_{2,6}\rangle = \frac{(p_1+p_4-2p)}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{B_{2,6}})}|B_{2,6}\rangle
\end{aligned} \tag{264}
$$

$$
\begin{aligned}
|\Psi^{(1)}_{4,3}\rangle &= \frac{\langle\varphi^{(0)}_3|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_3)}|\varphi^{(0)}_3\rangle = \frac{\langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}|D'_{0,8}\rangle \\
&= \frac{1}{(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}\frac{\delta_1+\delta_2}{2}(-p_1+p_4)\,|D'_{0,8}\rangle = \frac{(\delta_1+\delta_2)(-p_1+p_4)}{2(E_{B'_{0,8}}-E_{D'_{0,8}})}|D'_{0,8}\rangle
\end{aligned} \tag{265}
$$

$$
|\Psi^{(1)}_{4,5}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_5|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_5)}|\varphi^{(0)}_5\rangle = \frac{\langle 10|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{10})}|10\rangle = \frac{p_5}{\sqrt{2}(E_{B'_{0,8}}-E_{10})}|10\rangle \tag{266}
$$

$$
|\Psi^{(1)}_{4,6}\rangle = \frac{\langle\varphi^{(0)}_6|\hat{V}|\varphi^{(0)}_4\rangle}{(\epsilon_4-\epsilon_6)}|\varphi^{(0)}_6\rangle = \frac{\langle 12|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle}{(E_{B'_{0,8}}-E_{12})}|12\rangle = 0\cdot|12\rangle \tag{267}
$$

第 IV 部
KPO に対する摂動論 version2

9　$n=0$ と 8 が縮退する場合

9.1　有効モデルの定義

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^{\text{eff}}_{\text{KPO}} &= \begin{array}{c|ccccccc}
 & \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \\
|0\rangle & E_0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
|2\rangle & p_1 & E_2 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
|4\rangle & 0 & p_2 & E_4 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
|6\rangle & 0 & 0 & p_3 & E_6 & p_4 & 0 & 0 \\
|8\rangle & 0 & 0 & 0 & p_4 & E_8 & p_5 & 0 \\
|10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & E_{10} & p_6 \\
|12\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & E_{12}
\end{array}
= \begin{array}{c|ccccccc}
 & \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \\
|0\rangle & 0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
|2\rangle & p_1 & \Delta_1 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
|4\rangle & 0 & p_2 & \Delta_2 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
|6\rangle & 0 & 0 & p_3 & \Delta_1 & p_4 & 0 & 0 \\
|8\rangle & 0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & p_5 & 0 \\
|10\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & -\Delta_3 & p_6 \\
|12\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & -\Delta_4
\end{array} \\
&= \hat{H}_0 + \hat{V}
\end{aligned} \tag{268}
$$

ここで，この有効模型の非摂動 Hamiltonian $\hat{H}_0^{\text{eff}}$ と摂動 Hamiltonian $\hat{V}^{\text{eff}}$ はそれぞれ以下のように与える：

$$
\hat{H}_0^{\text{eff}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \Delta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \Delta_1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_3 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_4
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

$$
\hat{V}^{\text{eff}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
p_1 & 0 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & p_2 & 0 & p_3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & p_3 & 0 & p_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & p_5 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{269}
$$

$$
= \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\
\begin{pmatrix}
0 & \sqrt{2\cdot 1}p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\sqrt{2\cdot 1}p & 0 & \sqrt{4\cdot 3}p & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{4\cdot 3}p & 0 & \sqrt{6\cdot 5}p & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}p & 0 & \sqrt{8\cdot 7}p & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}p & 0 & \sqrt{10\cdot 9}p & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10\cdot 9}p & 0 & \sqrt{12\cdot 11}p \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{12\cdot 11}p & 0
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{270}
$$

ここで，$p_1 = \sqrt{2\cdot 1}p$, $p_2 = \sqrt{4\cdot 3}p$, $p_3 = \sqrt{6\cdot 5}p$, $p_4 = \sqrt{8\cdot 7}p$, $p_5 = \sqrt{10\cdot 9}p$, $p_6 = \sqrt{12\cdot 11}p$ である．

9.2

次に，この有効模型の非摂動 Hamiltonian $\hat{H}_0^{\text{eff}}$ に注目する．この Hamiltonian $\hat{H}_0^{\text{eff}}$ は Block 対角化されており，$\{|0\rangle, |2\rangle, |4\rangle, |6\rangle, |8\rangle\}$ と $|10\rangle, |12\rangle$ で張られる部分空間に分けることができ， Hamiltonian は以下のように書き直すことができる：

$$
\hat{H}_0^{\text{eff}} = \hat{H}_0^{0\to 8} \bigoplus \hat{H}_0^{10,12} \tag{271}
$$

ここで，

$$
\hat{H}_0^{0\to 8} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & p & 0 & 0 & 0 \\ p & \Delta_1 & p & 0 & 0 \\ 0 & p & \Delta_2 & p & 0 \\ 0 & 0 & p & \Delta_1 & p \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{272}
$$

$$
\hat{H}_0^{10,12} = \begin{array}{c} \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} -\Delta_3 & 0 \\ 0 & -\Delta_4 \end{pmatrix} \end{array} \tag{273}
$$

である．Hamiltonian $\hat{H}_0^{0\to 8}$ を対角化する．これを実行するために，まず，$\{|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle\}$ で張られる部分空間を考え，その空間における Hamiltonian $\hat{H}^{2,4,6}$ を以下のように定義する：

$$
\hat{H}^{2,4,6} = \begin{array}{c} \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| \end{array} \\ \begin{pmatrix} \Delta_1 & p_2 & 0 \\ p_2 & \Delta_2 & p_3 \\ 0 & p_3 & \Delta_1 \end{pmatrix} \end{array} \tag{274}
$$

ここで，$\Delta_1 > \Delta_2$ を仮定する．この Hamiltonian を対角化し，エネルギー固有値とエネルギー固有状態を求めると以下のように得られる：

エネルギー固有値

$$
E_{D_{2,6}} = \Delta_1 \tag{275}
$$

$$
\begin{aligned}
E_4 &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right)
\end{aligned} \tag{276}
$$

$$
\begin{aligned}
E_{B_{2,6}} =& \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right)
\end{aligned} \tag{277}
$$

$p_2 < p_3$ とすると，$E_4 < E_{B_{2,6}} < E_{D_{2,6}}$ である．

固有状態 $|2\rangle$, $|4\rangle$, $|6\rangle$ で展開する．

$$|\psi_D\rangle = C_0 \left\{ -\frac{p_3}{p_2}, 0, 1 \right\} \tag{278}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_4\rangle &= C_1 \left\{ \frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}}{2p_3}, 1 \right\} \\
&= C_1 \left\{ \frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}}{2p_3}, 1 \right\} \\
&= C_1 \left\{ \frac{p_2}{p_3}, \epsilon_+(\Delta_1, \Delta_2, p_2, p_3), 1 \right\}
\end{aligned} \tag{279}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{B_{2,6}}\rangle &= C_2 \left\{ \frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 - \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}}{2p_3}, 1 \right\} \\
&= C_2 \left\{ \frac{p_2}{p_3}, \epsilon_-(\Delta_1, \Delta_2, p_2, p_3), 1 \right\}
\end{aligned} \tag{280}$$

$$\epsilon_{\pm}(\Delta_1, \Delta_2, p_2, p_3) = -\frac{\Delta_1 - \Delta_2 \pm \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}}{2p_3} \tag{281}$$

規格化

$$|D_{2,6}\rangle \equiv |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{p_3}{p_2\sqrt{\left|\frac{p_3}{p_2}\right|^2+1}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\left|\frac{p_3}{p_2}\right|^2+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{p_3}{\sqrt{|p_3|^2+|p_2|^2}} \\ 0 \\ \frac{p_2}{\sqrt{|p_3|^2+|p_2|^2}} \end{pmatrix} \tag{282}$$

$$|4\rangle \equiv |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{p_2}{p_3\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ -\frac{\Delta_1-\Delta_2+\sqrt{{\Delta_1}^2-2\Delta_1\Delta_2+{\Delta_2}^2+4{p_2}^2+4{p_3}^2}}{2p_3\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_2}{p_3\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{\epsilon_+}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \end{pmatrix} \tag{283}$$

$$|B_{2,6}\rangle \equiv |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{p_2}{p_3\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ -\frac{\Delta_1-\Delta_2-\sqrt{{\Delta_1}^2-2\Delta_1\Delta_2+{\Delta_2}^2+4{p_2}^2+4{p_3}^2}}{2p_3\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_2}{p_3\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{\epsilon_-}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_2}{p_3}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_3}\right|^2+1}} \end{pmatrix} \tag{284}$$

ここで，パラメトリックドライブの振幅 β が十分小さい場合，次の状態を定義する：

$$|D_{2,6}\rangle = -a_{D,2}\,|2\rangle + a_{D,6}\,|6\rangle \tag{285}$$

$$|B_{2,6}\rangle = a_{B,2}\,|2\rangle + a_{B,6}\,|6\rangle \tag{286}$$

ここで，$a_{D,2} < a_{D,6}$, $a_{B,2} < a_{B,6}$ である．

$1/\sqrt{2} \simeq 0.70710678118$

$$\hat{H}_0 = E_0\,|0\rangle\langle 0| + E_8\,|8\rangle\langle 8| + E_{D_{2,6}}\,|D_{2,6}\rangle\langle D_{2,6}| + E_{B_{2,6}}\,|B_{2,6}\rangle\langle B_{2,6}| \tag{287}$$

$$\hat{V} = \sqrt{2\cdot 1}\beta\,|0\rangle\langle 2| + \sqrt{8\cdot 7}\beta\,|8\rangle\langle 6| + \text{h.c.} \tag{288}$$

$$\hat{H}_{\text{KPO}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2\cdot 1}\beta & 0 & 0 \\ \sqrt{2\cdot 1}\beta & \Delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_1 & \sqrt{8\cdot 7}\beta \\ 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{289}$$

次の状態を定義する：

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|2\rangle + |6\rangle) \tag{290}$$

$$|B_{2,6}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |6\rangle) \tag{291}$$

9.3

部分空間 $\{|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle\}$ 内で，対角化することができたため，これで，$|2\rangle$ と $|6\rangle$ の縮退を解くことができた．したがって，次に，Hamiltonian $\hat{H}_0^{0\to 8}$ に対して，縮退する摂動論を適用し，そのエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態を求めていくことにする．

そのために，まず，摂動 Hamiltonian を基底 $\{|D_{2,6}\rangle, |B_{2,6}\rangle, |0\rangle, |8\rangle, |10\rangle, |12\rangle\}$ で展開する：

$$\hat{V}^{\text{eff}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & p_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{292}$$

$$\hat{V}^{\text{eff}} = p_1\,|0\rangle\langle 2| + p_4\,|8\rangle\langle 6| + p_5\,|10\rangle\langle 8| + p_6\,|12\rangle\langle 10| + \text{h.c.} \tag{293}$$

$$
\hat{V}^{\text{eff}} = \begin{array}{c} \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \\ |0\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| & \langle 0| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} \langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|0\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|10\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|12\rangle \\ \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|0\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|10\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|12\rangle \\ \langle 0|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 0|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 0|\hat{V}|0\rangle & \langle 0|\hat{V}|8\rangle & \langle 0|\hat{V}|10\rangle & \langle 0|\hat{V}|12\rangle \\ \langle 8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 8|\hat{V}|0\rangle & \langle 8|\hat{V}|8\rangle & \langle 8|\hat{V}|10\rangle & \langle 8|\hat{V}|12\rangle \\ \langle 10|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 10|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 10|\hat{V}|0\rangle & \langle 10|\hat{V}|8\rangle & \langle 10|\hat{V}|10\rangle & \langle 10|\hat{V}|12\rangle \\ \langle 12|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 12|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 12|\hat{V}|0\rangle & \langle 12|\hat{V}|8\rangle & \langle 12|\hat{V}|10\rangle & \langle 12|\hat{V}|12\rangle \end{pmatrix} \end{array}
$$

$$
= \begin{array}{c} \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \\ |0\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| & \langle 0| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & \langle D_{2,6}|\hat{V}|0\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle B_{2,6}|\hat{V}|0\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|8\rangle & 0 & 0 \\ \langle 0|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 0|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & 0 & 0 & \langle 8|\hat{V}|10\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle 10|\hat{V}|8\rangle & 0 & \langle 10|\hat{V}|12\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle 12|\hat{V}|10\rangle & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{294}
$$

$$
\hat{V}^{\text{eff}} = \begin{array}{c} \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \\ |0\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| & \langle 0| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -a_{D,2}p_1 & a_{D,6}p_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{B,2}p_1 & a_{B,6}p_4 & 0 & 0 \\ -a_{D,2}p_1 & a_{B,2}p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{D,6}p_4 & a_{B,6}p_4 & 0 & 0 & p_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{295}
$$

行列要素の計算は以下である：

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|0\rangle = \langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|D_{2,6}\rangle = -a_{D,2}\,\langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|2\rangle + a_{D,6}\,\langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|6\rangle = -a_{D,2}p_1 \tag{296}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|8\rangle = \langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|D_{2,6}\rangle = -a_{D,2}\,\langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|2\rangle + a_{D,6}\,\langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|6\rangle = a_{D,6}p_4 \tag{297}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|10\rangle = \langle 10|\hat{V}^{\text{eff}}|D_{2,6}\rangle = 0 \tag{298}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|12\rangle = \langle 12|\hat{V}^{\text{eff}}|D_{2,6}\rangle = 0 \tag{299}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|0\rangle = \langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|B_{2,6}\rangle = a_{B,2}\,\langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|2\rangle + a_{B,6}\,\langle 0|\hat{V}^{\text{eff}}|6\rangle = a_{B,2}p_1 \tag{300}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|8\rangle = \langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|B_{2,6}\rangle = a_{B,2}\,\langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|2\rangle + a_{B,6}\,\langle 8|\hat{V}^{\text{eff}}|6\rangle = a_{B,6}p_4 \tag{301}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|10\rangle = \langle 10|\hat{V}^{\text{eff}}|B_{2,6}\rangle = 0 \tag{302}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}^{\text{eff}}|12\rangle = \langle 12|\hat{V}^{\text{eff}}|B_{2,6}\rangle = 0 \tag{303}$$

これら以外の行列要素は元の摂動 Hamiltonian より明らかである.

STEP1：固有状態の 1 次摂動を計算する

この摂動 Hamiltonian に従って，縮退のある摂動論を適用していく．まず，固有状態の 1 次摂動を計算する：

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = \sum_{\gamma\neq 0} |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} \\
+\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})} \\
+\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{10})} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned}
\tag{304}
$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)} - E_{n,8}^{(2)})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
- E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
- E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
- E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_{10}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ |\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} + |\varphi_{10}^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_{10}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \qquad (305)
\end{aligned}
$$

$|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,|0\rangle + C_{8,0}\,|8\rangle$, $|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8}\,|0\rangle + C_{8,8}\,|8\rangle$, $|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle = |D_{2,6}\rangle$, $|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle = |B_{2,6}\rangle$, $|\varphi_{10}^{(0)}\rangle = |10\rangle$ であるから，

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)} - E_{n,8}^{(2)})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ & \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
& - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ & \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
& - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ \Bigg\{ & \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \\
& - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|10\rangle\,\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ |D_{2,6}\rangle & \frac{\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle \frac{\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} + |10\rangle \frac{\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})}
\end{aligned}
\tag{306}
$$

ここで，

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = 0 \tag{307}$$

$$\langle 10|\hat{V}|10\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|10\rangle = \langle D_{2,6}|\hat{V}|10\rangle = \langle 10|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \langle 10|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = 0 \tag{308}$$

$$E_n^{(1)} = 0 \tag{309}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0}\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(-a_{D,2}p_1) + C_{8,0}(a_{D,6}p_4) \tag{310}$$

$$\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0}\,\langle B_{2,6}|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(a_{B,2}p_1) + C_{8,0}(a_{B,6}p_4) \tag{311}$$

$$\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,\langle 10|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0}\,\langle 10|\hat{V}|8\rangle = C_{8,0}(p_5) \tag{312}$$

であるから，

$$|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D_{2,6}\rangle\,\frac{\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle\,\frac{\langle B_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} + |10\rangle\,\frac{\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \tag{313}$$

$$|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D_{2,6}\rangle\,\frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle\,\frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})} + |10\rangle\,\frac{\langle 10|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})} \tag{314}$$

$$\begin{aligned} &= |D_{2,6}\rangle\,\frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})}\Big\{C_{0,0}(-a_{D,2}p_1) + C_{8,0}(a_{D,6}p_4)\Big\} \\ &+ |B_{2,6}\rangle\,\frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})}\Big\{C_{0,0}(a_{B,2}p_1) + C_{8,0}(a_{B,6}p_4)\Big\} \\ &+ |10\rangle\,\frac{1}{(\epsilon_n - \epsilon_{10})}C_{8,0}(p_5) \end{aligned} \tag{315}$$

永年方程式を解き，2 次の補正項と規格化定数を求める

永年方程式

$$\sum_{\beta=1}^{N}\left[E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta} - (\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\right]C_{\beta,\alpha} = 0, \tag{316}$$

ここで，

$$(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta} \equiv \sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)} \tag{317}$$

を解き，エネルギー固有値の 2 次の補正項 $E_{n,0}^{(2)}$, $E_{n,8}^{(2)}$ と固有状態の第ゼロ近似に関する展開係数，$C_{0,0}$, $C_{8,0}$, $C_{0,8}$, $C_{8,8}$ を求める．

まず，非摂動ハミルトニアンのエネルギー固有値のうち，縮退していない状態のエネルギー固有値は以下のように与えられる：

$$\epsilon_{D_{2,6}} = \Delta_1 \tag{318}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{B_{2,6}} &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \epsilon\right)\end{aligned} \tag{319}$$

ここで，

$$\epsilon \equiv \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2} = (\Delta_1 - \Delta_2)\sqrt{1 + \frac{4p_2^2 + 4p_3^2}{(\Delta_1 - \Delta_2)^2}} = (\Delta_1 - \Delta_2)\sqrt{1 + \delta_+}, \tag{320}$$

$$\delta_+ \equiv \frac{4(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)^2} \tag{321}$$

とおいた．次の Taylor 展開の公式を

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16} - \frac{5x^4}{128} + \frac{7x^5}{256} + O\left(x^6\right) \tag{322}$$

使うと，

$$\begin{aligned}\epsilon &\simeq (\Delta_1 - \Delta_2)\sqrt{1 + \delta_+} \\ &= (\Delta_1 - \Delta_2)\Big(1 + \frac{1}{2}\delta_+\Big) = (\Delta_1 - \Delta_2)\Big(1 + \frac{2(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)^2}\Big) \\ &= (\Delta_1 - \Delta_2) + \frac{2(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)}\end{aligned} \tag{323}$$

となり，エネルギー固有値 $\epsilon_{B_{2,6}}$ は以下のようになる：

$$\epsilon_{B_{2,6}} \simeq \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + (\Delta_1 - \Delta_2) + \frac{2(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)}\right) = \Delta_1 + \frac{(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)} = \Delta_1 + \delta_0 \tag{324}$$

ここで，

$$\delta_0 \equiv \frac{(p_2^2 + p_3^2)}{(\Delta_1 - \Delta_2)} \tag{325}$$

まず，2 次摂動に関する行列要素を計算する：

$$\begin{aligned}(\hat{V}^{(2)})_{0,0} &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|0\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_m)} = \frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 0|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} \\ &= \frac{|\langle 0|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{|\langle 0|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{(a_{B,2}p_1)^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(-a_{D,2}p_1)^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}\end{aligned} \tag{326}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8} = \sum_{m\neq n} \frac{\langle 8|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(8)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_8-\epsilon_m)} = \frac{\langle 8|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} + \frac{\langle 8|\hat{V}|10\rangle\langle 10|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{10})}$$

$$= \frac{|\langle 8|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{|\langle 8|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} + \frac{|\langle 8|\hat{V}|10\rangle|^2}{(-\epsilon_{10})} = \frac{(a_{B,6}p_4)^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(a_{D,6}p_4)^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} + \frac{p_5^2}{(-\epsilon_{10})} \tag{327}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,8} = (\hat{V}^{(2)})_{8,0} = \sum_{m\neq n} \frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_0-\epsilon_m)} = \frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}$$

$$= \frac{(a_{B,2}p_1)(a_{B,6}p_4)}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(-a_{D,2}p_1)(a_{D,6}p_4)}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} \tag{328}$$

$\epsilon_{B_{2,6}} = \Delta_1 + \delta_0$, $\epsilon_{D_{2,6}} = \Delta_1$ であるから,

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,0} = \frac{(a_{B,2}p_1)^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(-a_{D,2}p_1)^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{(a_{B,2}p_1)^2}{-(\Delta_1+\delta_0)} + \frac{(-a_{D,2}p_1)^2}{-\Delta_1}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{-\Delta_1-\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\right) \tag{329}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8} = \frac{(a_{B,6}p_4)^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(a_{D,6}p_4)^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} + \frac{p_5^2}{(-\epsilon_{10})} = \frac{1/2}{-\Delta_1-\delta_0} + \frac{1/2}{-\Delta_1} = \frac{1}{2}\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)} \tag{330}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,8} = \frac{(a_{B,2}p_1)(a_{B,6}p_4)}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(-a_{D,2}p_1)(a_{D,6}p_4)}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{-\Delta_1-\delta_0} - \frac{1}{-\Delta_1}\Big)$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\frac{\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\Big) = \frac{\delta_0}{B} \tag{331}$$

$$E_n^{(2)} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} + (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \mp \sqrt{D}}{2}, \tag{332}$$

$$D = [(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - \hat{V}^{(2)})_{8,8}]^2 + 4(\hat{V}^{(2)})_{0,8})^2$$

$$= 4\frac{1}{4}\Big(\frac{\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)}\Big)^2 = \frac{\delta_0^2}{\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}^2} \tag{333}$$

ここで断念

よって,

$$E_n^{(2)} = \frac{\frac{-2\Delta_1-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)} \mp \frac{\delta_0}{\{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)\}}}{2} = \frac{(-2\Delta_1-\delta_0)\mp\delta_0}{2\{-\Delta_1(-\Delta_1-\delta_0)\}} = \frac{A}{B}[1\mp\delta_0/A] \tag{334}$$

ここで，

$$A \equiv (-2\Delta_1 + \delta_0) \tag{335}$$

$$B \equiv 2\{-\Delta_1(-\Delta_1 + \delta_0)\} \tag{336}$$

$$\delta_0 = \frac{2p^2}{(\Delta_1 - \Delta_2)} \tag{337}$$

とおいた．

$E_n^{(2)} = E_{n,0}^{(2)}$ のとき，規格化定数の比は

$$\frac{C_{0,0}}{C_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - E_{n,0}^{(2)}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \pm \sqrt{D}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} \tag{338}$$

となるから，

$$\frac{C_{0,0}}{C_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - E_{n,0}^{(2)}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \pm \sqrt{D}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} \tag{339}$$

これより，$C_{0,0} = C_{0,8} = 1/\sqrt{2}$ を得る．すなわち，第 0 近似は

$$|\varphi_{n,0}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) \tag{340}$$

第 1 次近似は

$$|\varphi_{n,0}^1\rangle = |B_{2,6}\rangle \frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}}} \tag{341}$$

と求まるから，

$$|\varphi_{n,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) + |B_{2,6}\rangle \frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}}} \tag{342}$$

第 8 励起状態について，同様に計算を行う

第 8 励起状態については，

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = \sum_{\gamma\neq 8}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)}-E_{n,0}^{(2)})}\sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)}-E_{n,0}^{(2)})}\sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
= |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)}-E_{n,0}^{(2)})}\sum_{m\neq n}\Bigg[\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle\,\langle D_{2,6}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} \\
+\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})} \\
-E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
+\sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned}
\tag{343}
$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle & \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)} - E_{n,0}^{(2)})} \\
& \times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})^2} \Bigg\} \\
& + \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
& + |\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})}
\end{aligned}
\tag{344}
$$

$|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,|0\rangle + C_{8,0}\,|8\rangle$, $|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8}\,|0\rangle + C_{8,8}\,|8\rangle$, $|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle = |D_{2,6}\rangle$, $|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle = |B_{2,6}\rangle$ であるから,

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle & \frac{1}{(E_{n,8}^{(2)} - E_{n,0}^{(2)})} \\
\times & \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})^2} \Bigg\} \\
+ & \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad - E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};0|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})^2} \Bigg\}\Bigg] \\
+ & |D_{2,6}\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \qquad (345)
\end{aligned}
$$

ここで,

$$
\langle D|\hat{V}|D\rangle = \langle B|\hat{V}|B\rangle = \langle D|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|D\rangle = 0 \qquad (346)
$$

$$
E_n^{(1)} = 0 \qquad (347)
$$

$$
\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8}\,\langle D|\hat{V}|0\rangle + C_{8,8}\,\langle D|\hat{V}|8\rangle = C_{0,8}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \qquad (348)
$$

$$
\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle = C_{0,8}\,\langle B|\hat{V}|0\rangle + C_{8,8}\,\langle B|\hat{V}|8\rangle = C_{0,8}(p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \qquad (349)
$$

であるから,

$$
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D_{2,6}\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_8 - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle}{(\epsilon_8 - \epsilon_{B_{2,6}})} \qquad (350)
$$

$$
\begin{aligned}
&= |D_{2,6}\rangle \frac{1}{(\epsilon_8 - \epsilon_{D_{2,6}})} \Big\{ C_{0,8}(-p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \Big\} \\
&+ |B_{2,6}\rangle \frac{1}{(\epsilon_8 - \epsilon_{B_{2,6}})} \Big\{ C_{0,8}(p/\sqrt{2}) + C_{8,8}(p/\sqrt{2}) \Big\} \qquad (351)
\end{aligned}
$$

$$|\varphi_{n,8}^{(1)}\rangle = |D_{2,6}\rangle \frac{p}{(\epsilon_8 - \epsilon_{D_{2,6}})} \tag{352}$$

$$|\varphi_{n,8}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle + |8\rangle) + |D_{2,6}\rangle \frac{p}{\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}}} \tag{353}$$

9.4 縮退のない摂動論への移行

上での摂動計算によって，摂動論により，補正された固有状態が次のように得られた：

$$|B'_{0,8}\rangle \equiv |\varphi_{n,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |8\rangle) + \delta_1 |B_{2,6}\rangle , \tag{354}$$

$$\delta_1 \equiv \frac{p}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})} \tag{355}$$

$$|D'_{0,8}\rangle \equiv |\varphi_{n,8}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle + |8\rangle) + \delta_2 |D_{2,6}\rangle , \tag{356}$$

$$\delta_2 \equiv \frac{p}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})} \tag{357}$$

これで，すべての状態について，縮退が解け，縮退のない摂動論を用いて，有効模型の Hamiltonian のエネルギー固有値，対応するエネルギー固有状態を求めることが可能となる．まず，有効模型の摂動 Hamiltonian

$$\hat{V}^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & p_1 - p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_1 - p & 0 & p_2 - p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 - p & 0 & p_3 - p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 - p & 0 & p_4 - p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 - p & 0 & p_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & 0 & p_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{358}$$

を基底 $\{\langle 0|, \langle 2|, \langle 4|, \langle 6|, \langle 8|, \langle 10|, \langle 12|\}$ で $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ を表示すると，

$$\hat{V}^{\mathrm{eff}} = \begin{array}{c} \\ |4\rangle \\ |D_{2,6}\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \\ |D'_{0,8}\rangle \\ |B'_{0,8}\rangle \\ |10\rangle \\ |12\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 4| & \langle D_{2,6}| & \langle B_{2,6}| & \langle D'_{0,8}| & \langle B'_{0,8}| & \langle 10| & \langle 12| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & \langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & \langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & \langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle & \langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\ \langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle & 0 & 0 & \langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\ \langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle & 0 & 0 & \langle B_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & 0 & 0 \\ \langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle D'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 \\ \langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle & \langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle B_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle B'_{0,8}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle B'_{0,8}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & \langle 10|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle & 0 & p_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{359}$$

となる．行列要素が，0 となる場合だけ，あからさまに 0 と記述した．それ以外の，行列要素の具体的な値は，以下のように求まる：

$$\langle 4|\hat{V}|4\rangle = 0 \tag{360}$$

$$\langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \langle D_{2,6}|\hat{V}|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\langle 4|\hat{V}|2\rangle + \langle 4|\hat{V}|6\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{-(p_2-p)+(p_3-p)\Big\} \tag{361}$$

$$\langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 4|\hat{V}|2\rangle + \langle 4|\hat{V}|6\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{(p_2-p)+(p_3-p)\Big\} \tag{362}$$

$$\begin{aligned}\langle 4|\hat{V}|D_{0,8}\rangle = \langle D_{0,8}|\hat{V}|4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\langle 4|\hat{V}|0\rangle + \langle 4|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2\langle 4|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0+0) + \frac{\delta_2}{\sqrt{2}}\Big\{-(p_2-p)+(p_3-p)\Big\} \end{aligned}\tag{363}$$

$$\begin{aligned}\langle 4|\hat{V}|B_{0,8}\rangle = \langle B_{0,8}|\hat{V}|4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 4|\hat{V}|0\rangle + \langle 4|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2\langle 4|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0+0) + \frac{\delta_1}{\sqrt{2}}\Big\{(p_2-p)+(p_3-p)\Big\} \end{aligned}\tag{364}$$

$$\tag{365}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|6\rangle - \langle 6|\hat{V}|2\rangle) = 0 \tag{366}$$

$$\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle = \langle B_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle = \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|6\rangle + \langle 6|\hat{V}|2\rangle) = 0 \tag{367}$$

$$\begin{aligned}\langle D_{2,6}|\hat{V}|D'_{0,8}\rangle = \langle D'_{0,8}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle &= \langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{0,8}\rangle + \delta_2\langle D_{2,6}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_2\cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{(p_1-p)+(p_4-p)\Big\} \end{aligned}\tag{368}$$

$$\begin{aligned}\langle D_{2,6}|\hat{V}|B'_{0,8}\rangle = \langle B'_{0,8}|\hat{V}|D_{2,6}\rangle &= \langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{0,8}\rangle + \delta_1\langle D_{2,6}|\hat{V}|B_{2,6}\rangle \\ &= \frac{1}{2}(-\langle 2|\hat{V}|0\rangle + \langle 6|\hat{V}|8\rangle) + \delta_1\cdot 0 \\ &= \frac{1}{2}\Big\{-(p_1-p)+(p_4-p)\Big\} \end{aligned}\tag{369}$$

10　高次の摂動の計算について

今，KPO の光子数固有状態について，$|0\rangle$，$|4\rangle$ が縮退している場合を考える．また，高励起エネルギー固有状態は考えないとする．この場合の Hamiltonian は，

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \tag{370}$$

$$\hat{H}_0 = \Delta\,|2\rangle\langle 2|$$

$$\hat{H}' = p(|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|) = p(\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \tag{371}$$

ここで，$\hat{A} = |0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|$ である．Hamiltonian を $|0\rangle, |2\rangle, |4\rangle$ の基底を使って，行列表示すると，

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & p & 0 \\ p & \Delta & p \\ 0 & p & 0 \end{pmatrix} \tag{372}$$

この Hamiltonian を対角化すると

10.1　KPO に関する摂動論

偶数番目の Fock 状態で表現すれば

$$\hat{H}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| & \cdots & \cdots \end{array} \\ \begin{pmatrix} E_0 & \sqrt{2\cdot 1}\beta & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ \sqrt{2\cdot 1}\beta & E_2 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & E_4 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & E_6 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & E_8 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ldots & \ddots & \vdots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \vdots \end{pmatrix} \end{array} \tag{373}$$

まず，$n=0$ と $n=8$ が縮退している場合を考えよう．この場合の Hamiltonian は以下のように書ける：

$$\hat{H}_{\mathrm{KPO}} = \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\ \begin{pmatrix} E_0 & \sqrt{2\cdot 1}\beta & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2\cdot 1}\beta & E_2 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & E_4 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & E_6 & \sqrt{8\cdot 7}\beta \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & E_8 \end{pmatrix} \end{array} \tag{374}$$

$$= \begin{array}{c} \\ |0\rangle \\ |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 4| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2\cdot 1}\beta & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2\cdot 1}\beta & \Delta_1 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{4\cdot 3}\beta & \Delta_2 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6\cdot 5}\beta & \Delta_1 & \sqrt{8\cdot 7}\beta \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{375}$$

ここで，$E_0 = E_8 = 0$, $E_2 = E_6 = \Delta_1$, $E_4 = \Delta_2$ である．

Step1：$n = 2, 4, 6$ の部分空間での厳密解

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \Delta_1 & p_1 & 0 \\ p_1 & \Delta_2 & p_2 \\ 0 & p_2 & \Delta_1 \end{pmatrix} \tag{376}$$

エネルギー固有値

$$E_D = \Delta_1 \tag{377}$$

$$\begin{aligned} E_B &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \end{aligned} \tag{378}$$

$$\begin{aligned} E_4 =& \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{{\Delta_1}^2 - 2\Delta_1\Delta_2 + {\Delta_2}^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 4p_2^2 + 4p_3^2}\right) \end{aligned} \tag{379}$$

固有状態 $|2\rangle, |4\rangle, |6\rangle$ で展開する．

$$|\psi_D\rangle = C_0\left\{-\frac{p_3}{p_2}, 0, 1\right\} \tag{380}$$

$$\begin{aligned}|\psi_B\rangle &= C_1\left\{\frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1-\Delta_2+\sqrt{\Delta_1{}^2-2\Delta_1\Delta_2+\Delta_2{}^2+4p_2^2+4p_3^2}}{2p_3}, 1\right\} \\ &= C_1\left\{\frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1-\Delta_2+\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+4p_2^2+4p_3^2}}{2p_3}, 1\right\} \\ &= C_1\left\{\frac{p_2}{p_3}, \epsilon_+(\Delta_1,\Delta_2,p_1,p_2), 1\right\}\end{aligned} \tag{381}$$

$$\begin{aligned}|\psi_4\rangle &= C_2\left\{\frac{p_2}{p_3}, -\frac{\Delta_1-\Delta_2-\sqrt{\Delta_1{}^2-2\Delta_1\Delta_2+\Delta_2{}^2+4p_2^2+4p_3^2}}{2p_3}, 1\right\} \\ &= C_2\left\{\frac{p_2}{p_3}, \epsilon_-(\Delta_1,\Delta_2,p_1,p_2), 1\right\}\end{aligned} \tag{382}$$

$$\epsilon_\pm(\Delta_1,\Delta_2,p_1,p_2) = -\frac{\Delta_1-\Delta_2\pm\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+4p_2^2+4p_3^2}}{2p_3} \tag{383}$$

規格化

$$|D_{2,6}\rangle \equiv |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{p_2}{p_1\sqrt{\left|\frac{p_2}{p_1}\right|^2+1}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\left|\frac{p_2}{p_1}\right|^2+1}} \end{pmatrix} \tag{384}$$

$$|B_{2,6}\rangle \equiv |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_2\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ -\frac{\Delta_1-\Delta_2+\sqrt{\Delta_1{}^2-2\Delta_1\Delta_2+\Delta_2{}^2+4p_1{}^2+4p_2{}^2}}{2p_2\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_2\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{\epsilon_+}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_+|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \end{pmatrix} \tag{385}$$

$$|4\rangle \equiv |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_2\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ -\frac{\Delta_1-\Delta_2-\sqrt{\Delta_1{}^2-2\Delta_1\Delta_2+\Delta_2{}^2+4p_1{}^2+4p_2{}^2}}{2p_2\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_2\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{\epsilon_-}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{|\epsilon_-|^2+\left|\frac{p_1}{p_2}\right|^2+1}} \end{pmatrix} \tag{386}$$

ここで，パラメトリックドライブの振幅 β が十分小さい場合，
$1/\sqrt{2} \simeq 0.70710678118$

$$\hat{H}_0 = E_0 |0\rangle \langle 0| + E_8 |8\rangle \langle 8| + E_{D_{2,6}} |D_{2,6}\rangle \langle D| + E_B |B_{2,6}\rangle \langle B| \tag{387}$$

$$\hat{V} = \sqrt{2\cdot 1}\beta |0\rangle \langle 2| + \sqrt{8\cdot 7}\beta |8\rangle \langle 6| + \text{h.c.} \tag{388}$$

$$\hat{H}_{\text{KPO}} = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 2| & \langle 6| & \langle 8| \end{array} \\ \begin{array}{c} |0\rangle \\ |2\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2\cdot 1}\beta & 0 & 0 \\ \sqrt{2\cdot 1}\beta & \Delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_1 & \sqrt{8\cdot 7}\beta \\ 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{389}$$

次の状態を定義する：

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|2\rangle + |6\rangle) \tag{390}$$

$$|B_{2,6}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |6\rangle) \tag{391}$$

摂動 Hamiltonian を基底 $\{|0\rangle, |8\rangle, |D\rangle, |B_{2,6}\rangle\}$ で展開する：

$$\hat{V} = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 8| & \langle D| & \langle B| \end{array} \\ \begin{array}{c} |0\rangle \\ |8\rangle \\ |D\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \end{array} & \begin{pmatrix} \langle 0|\hat{V}|0\rangle & \langle 0|\hat{V}|8\rangle & \langle 0|\hat{V}|D\rangle & \langle 0|\hat{V}|B\rangle \\ \langle 8|\hat{V}|0\rangle & \langle 8|\hat{V}|8\rangle & \langle 8|\hat{V}|D\rangle & \langle 8|\hat{V}|B\rangle \\ \langle D|\hat{V}|0\rangle & \langle D|\hat{V}|8\rangle & \langle D|\hat{V}|D\rangle & \langle D|\hat{V}|B\rangle \\ \langle B|\hat{V}|0\rangle & \langle B|\hat{V}|8\rangle & \langle B|\hat{V}|D\rangle & \langle B|\hat{V}|B\rangle \end{pmatrix} \end{array} \tag{392}$$

$$= \begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} \langle 0| & \langle 8| & \langle D| & \langle B| \end{array} \\ \begin{array}{c} |0\rangle \\ |8\rangle \\ |D\rangle \\ |B_{2,6}\rangle \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{2}\beta/\sqrt{2} & \sqrt{2}\beta/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} & \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} \\ -\sqrt{2}\beta/\sqrt{2} & \sqrt{2}\beta/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} & \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{393}$$

$$\langle 0|\hat{V}|D\rangle = \langle D|\hat{V}|0\rangle = -\sqrt{2}\beta/\sqrt{2} \tag{394}$$

$$\langle 0|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|0\rangle = \sqrt{2}\beta/\sqrt{2} \tag{395}$$

$$\langle 8|\hat{V}|D\rangle = \langle D|\hat{V}|8\rangle = \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} \tag{396}$$

$$\langle 8|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|8\rangle = \sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2} \tag{397}$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle &= \sum_{\gamma\neq 0} |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
&\qquad -E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};\gamma|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
&\qquad + \sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\sum_{p\neq n} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_p^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_p^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_p)} \\
&\qquad -E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
&\qquad + \sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \\
&= |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)}-E_{n,8}^{(2)})} \sum_{m\neq n}\Bigg[\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_{D_{2,6}}^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} \\
&\qquad + \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{B_{2,6}}^{(0)}\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})} \\
&\qquad -E_n^{(1)}\frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\,\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)^2}\Bigg] \\
&\qquad + \sum_{m\neq n}|\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)}
\end{aligned}
\tag{398}
$$

$$
\begin{aligned}
|\varphi^{(1)}_{n,0}\rangle = |\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle & \frac{1}{(E^{(2)}_{n,0}-E^{(2)}_{n,8})} \\
& \times\Bigg[\Bigg\{\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad +\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad -E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})^2}\Bigg\} \\
& + \Bigg\{\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} \\
& \qquad +\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})} \\
& \qquad -E^{(1)}_n\frac{\langle\langle\varphi^{(0)}_n;8|\hat{V}|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\,\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})^2}\Bigg\}\Bigg] \\
& + |\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle\frac{\langle\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{D_{2,6}})} + |\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle\frac{\langle\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}|\hat{V}|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_{B_{2,6}})}
\end{aligned}
\tag{399}
$$

$|\varphi^{(0)}_n;0\rangle\rangle = C_{0,0}\,|0\rangle + C_{8,0}\,|8\rangle$, $|\varphi^{(0)}_n;8\rangle\rangle = C_{0,8}\,|0\rangle + C_{8,8}\,|8\rangle$, $|\varphi^{(0)}_{D_{2,6}}\rangle = |D\rangle$, $|\varphi^{(0)}_{B_{2,6}}\rangle = |B_{2,6}\rangle$ であるから,

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |\varphi_n^{(0)};8\rangle\rangle \frac{1}{(E_{n,0}^{(2)} - E_{n,8}^{(2)})} \\
\times \Bigg[\Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
- E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})^2} \Bigg\} \\
+ \Bigg\{ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|D\rangle\,\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} \\
+ \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \\
- E_n^{(1)} \frac{\langle\langle\varphi_n^{(0)};8|\hat{V}|B\rangle\,\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})^2} \Bigg\} \Bigg] \\
+ |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{B_{2,6}})} \qquad (400)
\end{aligned}
$$

ここで,

$$
\langle D|\hat{V}|D\rangle = \langle B|\hat{V}|B\rangle = \langle D|\hat{V}|B\rangle = \langle B|\hat{V}|D\rangle = 0 \qquad (401)
$$

$$
E_n^{(1)} = 0 \qquad (402)
$$

$$
\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,\langle D|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0}\,\langle D|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(-\sqrt{2}\beta/\sqrt{2}) + C_{8,0}(\sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2}) \qquad (403)
$$

$$
\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle = C_{0,0}\,\langle B|\hat{V}|0\rangle + C_{8,0}\,\langle B|\hat{V}|8\rangle = C_{0,0}(\sqrt{2}\beta/\sqrt{2}) + C_{8,0}(\sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2}) \qquad (404)
$$

であるから,

$$
|\varphi_{n,0}^{(1)}\rangle = |D\rangle \frac{\langle D|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})} + |B_{2,6}\rangle \frac{\langle B|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};0\rangle\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})} \qquad (405)
$$

$$
\begin{aligned}
= |D\rangle \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_{D_{2,6}})} \Big\{ C_{0,0}(-\sqrt{2}\beta/\sqrt{2}) + C_{8,0}(\sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2}) \Big\} \\
+ |B_{2,6}\rangle \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_{B_{2,6}})} \Big\{ C_{0,0}(\sqrt{2}\beta/\sqrt{2}) + C_{8,0}(\sqrt{8\cdot 7}\beta/\sqrt{2}) \Big\} \qquad (406)
\end{aligned}
$$

永年方程式を解き，2 次の補正項と規格化定数を求める

永年方程式

$$\sum_{\beta=1}^{N}\left[E_n^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\right]C_{\beta,\alpha}=0, \tag{407}$$

ここで,

$$(\hat{V}^{(2)})_{\alpha,\beta}\equiv\sum_{m\neq n}\frac{\langle\varphi_n^{(0)};\alpha|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)};\beta\rangle}{(\epsilon_n-\epsilon_m)} \tag{408}$$

を解き，エネルギー固有値の 2 次の補正項 $E_{n,0}^{(2)}$, $E_{n,8}^{(2)}$ と固有状態の第ゼロ近似に関する展開係数，$C_{0,0}$, $C_{8,0}$, $C_{0,8}$, $C_{8,8}$ を求める．

まず，非摂動ハミルトニアンのエネルギー固有値のうち，縮退していない状態のエネルギー固有値は以下のように与えられる：

$$\epsilon_{D_{2,6}}=\Delta_1 \tag{409}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{B_{2,6}}&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\sqrt{{\Delta_1}^2-2\Delta_1\Delta_2+{\Delta_2}^2+4p_2^2+4p_3^2}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+4p_2^2+4p_3^2}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\Delta_1+\Delta_2-\epsilon\right)\end{aligned} \tag{410}$$

ここで,

$$\epsilon\equiv\sqrt{(\Delta_1-\Delta_2)^2+4p_2^2+4p_3^2}=(\Delta_1-\Delta_2)\sqrt{1+\frac{4p_2^2+4p_3^2}{(\Delta_2-\Delta_1)^2}} \tag{411}$$

とおいた．

$$x\equiv\frac{4p_2^2+4p_3^2}{(\Delta_2-\Delta_1)^2} \tag{412}$$

とおき，次の Taylor 展開の公式を

$$\sqrt{1+x}=1+\frac{x}{2}-\frac{x^2}{8}+\frac{x^3}{16}-\frac{5x^4}{128}+\frac{7x^5}{256}+O\left(x^6\right) \tag{413}$$

使うと，

$$\epsilon \simeq (\Delta_1 - \Delta_2)\sqrt{1 + \frac{4p_2^2 + 4p_3^2}{(\Delta_2 - \Delta_1)^2}}$$

$$= (\Delta_2 - \Delta_1)\Big(1 + \frac{4p_2^2 + 4p_3^2}{2(\Delta_2 - \Delta_1)^2}\Big) = (\Delta_2 - \Delta_1)\Big(1 + \frac{2({p_2}^2 + {p_3}^2)}{(\Delta_2 - \Delta_1)^2}\Big)$$

$$= (\Delta_2 - \Delta_1) + \frac{2({p_2}^2 + {p_3}^2)}{(\Delta_2 - \Delta_1)} \tag{414}$$

となり，エネルギー固有値 $\epsilon_{B_{2,6}}$ は以下のようになる：

$$\epsilon_{B_{2,6}} \simeq \frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 - (\Delta_2 - \Delta_1) + \frac{2({p_2}^2 + {p_3}^2)}{(\Delta_2 - \Delta_1)}\right) = \Delta_1 - \frac{{p_2}^2 + {p_3}^2}{(\Delta_2 - \Delta_1)} = \Delta_1 - \delta_0 \tag{415}$$

ここで，

$$\delta_0 \equiv \frac{{p_2}^2 + {p_3}^2}{(\Delta_2 - \Delta_1)} \tag{416}$$

まず，2 次摂動に関する行列要素を計算する：

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,0} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|0\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_m)} = \frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 0|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}$$

$$= \frac{|\langle 0|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{|\langle 0|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{(2\cdot 1)/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(2\cdot 1)/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} \tag{417}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle 8|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(8)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_8 - \epsilon_m)} = \frac{\langle 8|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}$$

$$= \frac{|\langle 8|\hat{V}|B\rangle|^2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{|\langle 8|\hat{V}|D\rangle|^2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{(8\cdot 7)/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{(8\cdot 7)/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} \tag{418}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,8} = (\hat{V}^{(2)})_{8,0} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle 0|\hat{V}|\varphi_m^{(8)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|8\rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_m)} = \frac{\langle 0|\hat{V}|B\rangle\langle B|\hat{V}|8\rangle}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{\langle 8|\hat{V}|D\rangle\langle D|\hat{V}|0\rangle}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}$$

$$= \frac{\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{-\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} \tag{419}$$

$\epsilon_{B_{2,6}} = \Delta_1 - \delta_0$, $\epsilon_{D_{2,6}} = \Delta_1$ であるから，

$$(\hat{V}^{(2)})_{0,0} = \frac{1/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})} + \frac{1/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})} = \frac{1}{-\Delta_1 + \delta_0} + \frac{1}{-\Delta_1}$$

$$= \frac{-\Delta_1 - \Delta_1 + \delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1 + \delta_0)} = \frac{-2\Delta_1 + \delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1 + \delta_0)} \tag{420}$$

$$(\hat{V}^{(2)})_{8,8}=\frac{(8\cdot 7)/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})}+\frac{(8\cdot 7)/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}=\frac{(8\cdot 7)/2}{-\Delta_1+\delta_0}+\frac{(8\cdot 7)/2}{-\Delta_1}=\frac{8\cdot 7}{2}\frac{-2\Delta_1+\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)} \tag{421}$$

$$\begin{aligned}(\hat{V}^{(2)})_{0,8}&=\frac{\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}/2}{(-\epsilon_{B_{2,6}})}+\frac{-\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}/2}{(-\epsilon_{D_{2,6}})}=\frac{\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}}{2}\Big(\frac{1}{-\Delta_1+\delta_0}-\frac{1}{-\Delta_1}\Big)\\&=\frac{\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}}{2}\Big(\frac{-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\Big)=\frac{\epsilon'}{B}\end{aligned} \tag{422}$$

ここで，$\epsilon'=\sqrt{8\cdot 7\cdot 2\cdot 1}(-\delta_0)$ とおいた.

$$E_n^{(2)}=\frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0}+(\hat{V}^{(2)})_{8,8}\mp\sqrt{D}}{2}, \tag{423}$$

$$\begin{aligned}D&=[(\hat{V}^{(2)})_{0,0}-\hat{V}^{(2)})_{8,8}]^2+4(\hat{V}^{(2)})_{0,8})^2\\&=(28-1)^2\left(\frac{-2\Delta_1+\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\right)^2+4\frac{8\cdot 7\cdot 2}{4}\Big(\frac{-\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\Big)^2\\&=\frac{27^2(-2\Delta_1+\delta_0)^2+8\cdot 7\cdot 2\delta_0^2}{\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}^2}\end{aligned} \tag{424}$$

よって,

$$\begin{aligned}E_n^{(2)}&=\frac{27\frac{-2\Delta_1+\delta_0}{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)}\mp\sqrt{\frac{27^2(-2\Delta_1+\delta_0)^2+8\cdot 7\cdot 2\delta_0^2}{\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}^2}}}{2}\\&=\frac{27(-2\Delta_1+\delta_0)\mp\sqrt{27^2(-2\Delta_1+\delta_0)^2+8\cdot 7\cdot 2\delta_0^2}}{2\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}}\\&=\frac{27(-2\Delta_1+\delta_0)}{2\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\}}\left[1\mp\sqrt{1+\frac{8\cdot 7\cdot 2\delta_0^2}{27^2(-2\Delta_1+\delta_0)^2}}\right]\\&=\frac{A}{B}[1\mp\sqrt{1+\delta}]\end{aligned} \tag{425}$$

ここで,

$$A\equiv 27(-2\Delta_1+\delta_0) \tag{426}$$

$$B\equiv 2\{-\Delta_1(-\Delta_1+\delta_0)\} \tag{427}$$

$$C\equiv\epsilon'^2=8\cdot 7\cdot 2\delta_0^2 \tag{428}$$

$$\delta=C/A^2 \tag{429}$$

$$\delta_0=\frac{{p_2}^2+{p_3}^2}{(\Delta_2-\Delta_1)} \tag{430}$$

とおいた．

$E_n^{(2)} = E_{n,0}^{(2)}$ のとき，規格化定数は

$$\frac{C_{0,0}}{C_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - E_{n,0}^{(2)}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} = \frac{(\hat{V}^{(2)})_{0,0} - (\hat{V}^{(2)})_{8,8} \pm \sqrt{D}}{2(\hat{V}^{(2)})_{0,8}} \tag{431}$$

$$\tag{432}$$

第 V 部
その他の摂動論について

11 Schrieffer-Wolff 変換

Schrieffer-Wolff 変換とは，非対角項を持つ Hamiltonian に対して，近似的に対角化を行う，一種の摂動論である．

Schrieffer-Wolff transiformation is a perturbation theory which a Hamiltonian with off-diagonal elements approximately diagonalize.

We consider the following Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} \tag{433}$$

where, $\hat{H}_0$ is the non-perturbative Hamiltonian and $\hat{V}$ is the interaction Hamiltonian. Here, we decompose $\hat{V} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, where $\hat{H}_1$ and $\hat{H}_2$ denote ブロック対角 Hamiltonian and 非対角ブロック Hamiltonian.

The Schrieffer-Wolff transformation is defined by

$$\hat{H}' \equiv e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}}, \tag{434}$$

where $\hat{S}$ is an anti-Hermitian operator.

We choose $\hat{S}$ such that $\hat{H}'$ satisfies

Using BCH-fomula,

$$e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} = \hat{H} + [\hat{S}, \hat{H}] + \frac{1}{2!}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] + \frac{1}{3!}\Big[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]\Big] + \cdots \tag{435}$$

$$\begin{aligned} e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} &= \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} + [\hat{S}, \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}] + \frac{1}{2!}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}]] + \frac{1}{3!}\Big[\hat{S}, \big[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}]\big]\Big] + \cdots \\ &= \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} + [\hat{S}, \hat{H}_0] + \lambda[\hat{S}, \hat{V}] + \frac{1}{2!}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0]] + \frac{1}{2!}\lambda[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{V}]] + \cdots && (436) \\ &= \hat{H}_0 + \hat{W}, && (437) \end{aligned}$$

where

$$\hat{W} = \lambda\hat{V} + [\hat{S}, \hat{H}_0] + \lambda[\hat{S}, \hat{V}] + \frac{1}{2!}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0]] + \frac{1}{2!}\lambda[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{V}]] + \cdots \tag{438}$$

この演算子は level-shift 演算子と呼ばれている．

11.1 Iterative calculation of $\hat{S}$

We expand $\hat{S}$ as $\sum_n \lambda^n \hat{S_n}$, so we obtain

$$\begin{aligned}
e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} &= \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} + \left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \hat{H}_0\right] + \lambda\left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \hat{V}\right] \\
&\quad + \frac{1}{2!}\left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \hat{H}_0\right]\right] + \frac{1}{2!}\lambda\left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \left[\sum_n \lambda^n \hat{S_n}, \hat{V}\right]\right] + \cdots \\
&= \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} + \lambda[\hat{S}_1, \hat{H}_0] + \lambda^2[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + \lambda^2[\hat{S}_1, \hat{V}] + \frac{1}{2!}\lambda^2\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right] + \mathcal{O}(\lambda^3) \\
&= \hat{H}_0 + \lambda\left\{\hat{V} + [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right\} + \lambda^2\left\{[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + [\hat{S}_1, \hat{V}] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} + \mathcal{O}(\lambda^3)
\end{aligned} \tag{439}$$

λ の次数について，整理すると，

$$\begin{aligned}
e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} &= \hat{H}_0 + \lambda\left\{\hat{V} + [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right\} \\
&\quad + \lambda^2\left\{[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + [\hat{S}_1, \hat{V}] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} + \mathcal{O}(\lambda^3)
\end{aligned} \tag{440}$$

$$e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} = \hat{H}_0 + \lambda\left\{\hat{V} + [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right\} + \lambda^2\left\{[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + [\hat{S}_1, \hat{V}] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} + \mathcal{O}(\lambda^3) \tag{441}$$

We have $\hat{V} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ and obtain

$$\begin{aligned}
e^{\hat{S}}\hat{H}e^{-\hat{S}} &= \hat{H}_0 + \lambda\left\{\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right\} + \lambda^2\left\{[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + [\hat{S}_1, \hat{H}_1] + [\hat{S}_1, \hat{H}_2] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} + \mathcal{O}(\lambda^3) \\
&= \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 + \lambda^2\left\{[\hat{S}_1, \hat{H}_2] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} \\
&\quad + \lambda\left\{\hat{H}_2 + [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right\} + \lambda^2\left\{[\hat{S}_2, \hat{H}_0] + [\hat{S}_1, \hat{H}_1]\right\} + \mathcal{O}(\lambda^3)
\end{aligned} \tag{442}$$

ここで，$[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]]$ は [非ブロック対角, [非ブロック対角, ブロック対角]]=[非ブロック対角, ブロック対角]=ブロック対角よりブロック対角,$[\hat{S}_2, \hat{H}_0]$, $[\hat{S}_1, \hat{H}_1]$ は非ブロック対角行列である．なぜならば，ブロック対角行列と非ブロック対角行列の交換関係は非ブロック対角であり、2 つの非ブロック対角行列の交換関係はブロック対角になるからである．

Here, we choose $\hat{S}_1$ and $\hat{S}_2$ to cancel the off-diagonal elements of $\hat{H}'$,

$$[\hat{S}_1, \hat{H}_0] = -\hat{H}_2 \tag{443}$$

$$[\hat{S}_2, \hat{H}_0] = -[\hat{S}_1, \hat{H}_1] \tag{444}$$

Therefore we obtain the effective Hamiltonian

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 + \lambda^2\left\{[\hat{S}_1, \hat{H}_2] + \frac{1}{2}\left[\hat{S}_1, [\hat{S}_1, \hat{H}_0]\right]\right\} \tag{445}$$

$$= \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 + \lambda^2\left\{[\hat{S}_1, \hat{H}_2] - \frac{1}{2}[\hat{S}_1, \hat{H}_2]\right\}$$

$$= \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 + \frac{1}{2}\lambda^2[\hat{S}_1, \hat{H}_2] \tag{446}$$

11.2 Example : Jaynes-Cumings model

We introduce the Jaynes-Cumings model. The Hamiltonian is given by

$$\hat{H}_{\mathrm{JC}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar g(\hat{\sigma}_+\hat{a} + \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger) \tag{447}$$

To construct of an effective Hamiltonian, we can list out the diagonal and off-diagonal parts of the Hamiltonian as $\hat{H}_0$ and $\hat{V} = \hat{H}_2$ respectively:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{448}$$

$$\hat{V} = \hbar g(\hat{\sigma}_+\hat{a} + \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger) \tag{449}$$

We assume that $\hat{S}_1$ is given by

$$\hat{S}_1 = -\sum_{m,n} \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{E_m - E_n} |m\rangle\langle n| . \tag{450}$$

これは，$\hat{H}_0$ の固有状態で，

$$\hat{S}_1 = \sum_{m,n} |m\rangle\langle m|\hat{S}_1|n\rangle\langle n| = \sum_{m,n} c_{m,n} |m\rangle\langle n| \tag{451}$$

をと展開し，(**??**) へ代入することで得られる．

Using $\hat{S}_1$, we obtain

$$\hat{S}_1 = -\sum_{m,n}\left[\frac{\langle m|\hat{\sigma}_+\hat{a}|n\rangle}{E_m - E_n}|m\rangle\langle n| + \frac{\langle m|\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger|n\rangle}{E_m - E_n}|m\rangle\langle n|\right]$$

$$= \frac{g}{\Delta}(\hat{\sigma}_+\hat{a} - \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger) \tag{452}$$

where $\Delta = \omega - \omega_0$. We adapt the Schrieffer-Wolff transformation of $\hat{S}_1$, and we obtain

$$
\begin{aligned}
\hat{H}' &= \hat{H}_0 + \frac{1}{2}\lambda^2[\hat{S}_1, \hat{H}_2] \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar g^2}{\Delta}(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{\sigma}_z\hat{a}^\dagger\hat{a}) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+) + \hbar\omega_0(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+)\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \frac{\hbar g^2}{\Delta}(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+)\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+ + \hbar\omega_0\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar\omega_0\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{\hbar g^2}{\Delta}\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega\left|e\right\rangle\left\langle e\right| - \frac{1}{2}\hbar\omega\left|g\right\rangle\left\langle g\right| + \hbar\omega_0\left|e\right\rangle\left\langle e\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar\omega_0\left|g\right\rangle\left\langle g\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|e\right\rangle\left\langle e\right| + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|e\right\rangle\left\langle e\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|g\right\rangle\left\langle g\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega\left|e\right\rangle\left\langle e\right| + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|e\right\rangle\left\langle e\right| + \hbar\omega_0\left|e\right\rangle\left\langle e\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|e\right\rangle\left\langle e\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{1}{2}\hbar\omega\left|g\right\rangle\left\langle g\right| + \hbar\omega_0\left|g\right\rangle\left\langle g\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{\hbar g^2}{\Delta}\left|g\right\rangle\left\langle g\right|\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \left|e\right\rangle\left\langle e\right| \otimes \left\{\left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\right) + \left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar g^2}{\Delta}\right)\hat{a}^\dagger\hat{a}\right\} + \left|g\right\rangle\left\langle g\right|\left\{-\frac{1}{2}\hbar\omega + \left(\hbar\omega_0 - \frac{\hbar g^2}{\Delta}\right)\hat{a}^\dagger\hat{a}\right\}
\end{aligned} \tag{453}
$$

where we calculate

$$
\begin{aligned}
[\hat{S}_1, \hat{H}_2] &= \hat{S}_1\hat{H}_2 - \hat{H}_2\hat{S}_1 \\
&= \frac{g^2}{\Delta}[(\hat{\sigma}_+\hat{a} - \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger), (\hat{\sigma}_+\hat{a} + \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger)] \\
&= \frac{g^2}{\Delta}\Big\{[\hat{\sigma}_+\hat{a}, \hat{\sigma}_+\hat{a}] + [\hat{\sigma}_+\hat{a}, \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger] - [\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger, \hat{\sigma}_+\hat{a}] - [\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger, \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger]\Big\} \\
&= \frac{g^2}{\Delta}\Big\{[\hat{\sigma}_+\hat{a}, \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger] - [\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger, \hat{\sigma}_+\hat{a}]\Big\} \\
&= \frac{g^2}{\Delta}\Big\{(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a}) - (\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}\hat{a}^\dagger)\Big\} \\
&= \frac{2g^2}{\Delta}(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a})
\end{aligned} \tag{454}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a} &= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + (\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+)\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{\sigma}_z\hat{a}^\dagger\hat{a}
\end{aligned} \tag{455}
$$

12 Peter Knight perturbation

12.1 $|0\rangle$ and $|4\rangle$

今，KPO の光子数固有状態について，$|0\rangle$，$|4\rangle$ が縮退している場合を考える．また，高励起エネルギー固有状態は考えないとする．この場合の Hamiltonian は,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \tag{456}$$

$$\hat{H}_0 = \Delta |2\rangle \langle 2|$$

$$\hat{H}' = p(|0\rangle \langle 2| + |4\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 0| + |2\rangle \langle 4|) = p(\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \tag{457}$$

The timed-dependent Schrödinger equation in the Schrödinger picture(SP) is

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}\right) |\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle \tag{458}$$

where $|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle$ is the state vector in the SP.

We now can transform out of the interaction picture (IP) using the transformation

$$\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t} = e^{-i\Delta |2\rangle\langle 2| t} \tag{459}$$

The state vector in the IP is given by

$$|\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger |\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle \tag{460}$$

and the SchÖdinger equation in the IP becomes

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}\right) |\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle, \tag{461}$$

where

$$\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t) = \hat{U}_0^\dagger \hat{H} \hat{U}_0 - i\hbar \hat{U}_0^\dagger \frac{d}{dt} \hat{U}_0 \tag{462}$$

$$= \hat{H}_0 + \beta\left((|0\rangle \langle 2| + |4\rangle \langle 2|)e^{i\Delta t} + (|2\rangle \langle 0| + |2\rangle \langle 4|)e^{-i\Delta t}\right) - i\hbar \hat{U}_0^\dagger \left(-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}\right) \hat{U}_0 \tag{463}$$

$$= \beta\left((|0\rangle \langle 2| + |4\rangle \langle 2|)e^{i\Delta t} + (|2\rangle \langle 0| + |2\rangle \langle 4|)e^{-i\Delta t}\right)$$

$$= \beta\left(\hat{A}e^{i\Delta t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t}\right) \tag{464}$$

Also, we use the following relation

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{a} \hat{U}_0 = \hat{a} e^{-i\omega t} \tag{465}$$

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{U}_0 = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}, \tag{466}$$

and

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{\sigma}_\pm \hat{U}_0 = \hat{\sigma}_\pm e^{\pm i\omega t}. \tag{467}$$

The detuning will be assumed large, $\Delta \gg 1$.

The solution to Eq. (**??**) can be written formally as

$$|\psi_{\rm IP}(t)\rangle = \hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right]|\psi_{\rm IP}(0)\rangle\,. \tag{468}$$

We make the pertubation expansion

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right] \\
&= \hat{\mathcal{T}}\left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'')\right] \\
&= \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2}\int_0^t dt' \hat{\mathcal{T}}\left[\int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'')\right]
\end{aligned} \tag{469}$$

The second term in Eq.(527) yields

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') &= \int_0^t dt' \left[\beta\left(\hat{A}e^{i\Delta t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t}\right)\right] \\
&= \beta\left[\hat{A}\frac{e^{i\Delta t'}}{i\Delta} + \hat{A}^\dagger \frac{e^{-i\Delta t'}}{-i\Delta}\right]_0^t \\
&= \frac{\beta}{i\Delta}\left[\hat{A}\left(e^{i\Delta t} - 1\right) - \hat{A}^\dagger\left(e^{-i\Delta t} - 1\right)\right]
\end{aligned} \tag{470}$$

The second-oder term now becomes

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t'') &= \frac{\beta^2}{i\Delta}\int_0^t dt' \left[\hat{A}e^{i\Delta t'} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t'}\right] \times \left[\hat{A}\left(e^{i\Delta t'} - 1\right) - \hat{A}^\dagger\left(e^{-i\Delta t'} - 1\right)\right] \\
&= \frac{\beta^2}{i\Delta}\int_0^t dt' \Bigg[\hat{A}^2 e^{2i\Delta t'} - \hat{A}^2 e^{i\Delta t'} - \hat{A}^{\dagger 2} e^{-2i\Delta t'} + \hat{A}^{\dagger 2} e^{-i\Delta t'} \\
&\quad + \hat{A}^\dagger \hat{A}(1 - e^{-i\Delta t'}) - \hat{A}\hat{A}^\dagger(1 - e^{i\Delta t'})\Bigg]
\end{aligned} \tag{471}$$

t' に関する積分を実行すると，terms of g^2/Δ^2 に関する項が出てくるが，detuning が十分大きい場合にはこれらの項は小さくなり無視できる．Thus we obtain

$$\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t'') \simeq \frac{i\hbar^2 g^2}{\Delta} t[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] \tag{472}$$

ここで，$\hat{A} = |0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|$ である．

Thus to second order time evolution operator we have

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{g}{\Delta}[\hat{A}(e^{i\Delta t}-1) - \hat{A}^\dagger(e^{-i\Delta t}-1)] - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger]. \tag{473}$$

もし，平均光子数 $\langle \hat{A}\rangle \simeq (\langle \hat{A}^\dagger \hat{A}\rangle)^{1/2}$ が小さく，

$$\left|\frac{g}{\Delta}(\langle \hat{A}^\dagger \hat{A}\rangle)^{1/2}\right| \ll 1 \tag{474}$$

If the mean excitation A is not large and if B, assumed vaild because of the large detuning, then the second term of Eq. 1.

平均励起 A が大きくなく、B の場合、離調が大きいために有効であると想定される場合、式（1）の第 2 項は次のようになります。 1.1。

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\rm eff}t, \tag{475}$$

where

$$\hat{H}_{\rm eff} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger]. \tag{476}$$

For our model we have $\hat{A} = |0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|$ so that

$$\hat{H}_{\rm eff} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = \frac{\beta^2}{\Delta}\left[|0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 4| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 0| - 2|2\rangle\langle 2|\right] \tag{477}$$

where we have

$$\begin{aligned}
[\hat{A},\hat{A}^\dagger] &= \left[|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|, |2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|\right] \\
&= \left(|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|\right)\left(|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|\right) - \left(|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|\right)\left(|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|\right) \\
&= \left(|0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 4|\right) - 2|2\rangle\langle 2|
\end{aligned} \tag{478}$$

また，ここで，次の Bright state と Dark state を定義する：

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |4\rangle) \tag{479}$$

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |4\rangle) \tag{480}$$

すると，上で求めた有効 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\rm eff} = \frac{2\beta^2}{\Delta}\left[|B\rangle\langle B| - |2\rangle\langle 2|\right] \tag{481}$$

where we use

$$2|B\rangle\langle B| = |0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 4| \tag{482}$$

12.2 $|0\rangle$ and $|6\rangle$

今，KPO の光子数固有状態について，$|0\rangle$，$|6\rangle$ が縮退している場合を考える．また，高励起エネルギー固有状態は考えないとする．この場合の Hamiltonian は,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \tag{483}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \Delta_2 |2\rangle\langle 2| + \Delta_4 |4\rangle\langle 4| \\
\hat{H}' &= p(|0\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 4| + |6\rangle\langle 4| + |2\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 6|) \\
&= p(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)
\end{aligned} \tag{484}$$

The timed-dependent Schrödinger equation in the Schrödinger picture(SP) is

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}\right)|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle \tag{485}$$

where $|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle$ is the state vector in the SP.

We now can transform out of the interaction picture (IP) using the transformation

$$\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t} = e^{-i\Delta|2\rangle\langle 2|t} \tag{486}$$

The state vector in the IP is given by

$$|\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle \tag{487}$$

and the SchÖdinger equation in the IP becomes

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}\right)|\psi_{\mathrm{IP}}(t)\rangle, \tag{488}$$

where

$$\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t) = \hat{U}_0^\dagger\hat{H}\hat{U}_0 - i\hbar\hat{U}_0^\dagger\frac{d}{dt}\hat{U}_0 \tag{489}$$

$$= \hat{H}_0 + \beta\left((|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|)e^{i\Delta t} + (|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|)e^{-i\Delta t}\right) - i\hbar\hat{U}_0^\dagger\left(-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}\right)\hat{U}_0 \tag{490}$$

$$\begin{aligned}
&= \beta\left((|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|)e^{i\Delta t} + (|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4|)e^{-i\Delta t}\right) \\
&= \beta\left(\hat{A}e^{i\Delta t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t}\right)
\end{aligned} \tag{491}$$

Also, we use the following relation

$$\hat{U}_0^\dagger\hat{a}\hat{U}_0 = \hat{a}e^{-i\omega t} \tag{492}$$

$$\hat{U}_0^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{U}_0 = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}, \tag{493}$$

and

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{\sigma}_\pm \hat{U}_0 = \hat{\sigma}_\pm e^{\pm i\omega t}. \tag{494}$$

The detuning will be assumed large, $\Delta \gg 1$.

The solution to Eq. (**??**) can be written formally as

$$|\psi_{\rm IP}(t)\rangle = \hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right]|\psi_{\rm IP}(0)\rangle\,. \tag{495}$$

We make the pertubation expansion

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t')\right)\right] \\
&= \hat{\mathcal{T}}\left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'') + \frac{(-i)^3}{3!\hbar^3}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \int_0^{t''} dt''' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'')\hat{H}_{\rm IP}(t''')\right] \\
&= \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2}\int_0^t dt' \hat{\mathcal{T}}\left[\int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'')\right] \\
&+ \frac{(-i)^3}{3!\hbar^3}\hat{\mathcal{T}}\left[\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \int_0^{t''} dt''' \hat{H}_{\rm IP}(t')\hat{H}_{\rm IP}(t'')\hat{H}_{\rm IP}(t''')\right]
\end{aligned} \tag{496}$$

The second term in Eq.(527) yields

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') &= \int_0^t dt' \left[\beta\left(\hat{A}e^{i\Delta t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t}\right)\right] \\
&= \beta\left[\hat{A}\frac{e^{i\Delta t'}}{i\Delta} + \hat{A}^\dagger \frac{e^{-i\Delta t'}}{-i\Delta}\right]_0^t \\
&= \frac{\beta}{i\Delta}\left[\hat{A}\left(e^{i\Delta t} - 1\right) - \hat{A}^\dagger\left(e^{-i\Delta t} - 1\right)\right]
\end{aligned} \tag{497}$$

The second-oder term now becomes

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t'') &= \frac{\beta^2}{i\Delta}\int_0^t dt' \left[\hat{A}e^{i\Delta t'} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t'}\right] \times \left[\hat{A}\left(e^{i\Delta t'} - 1\right) - \hat{A}^\dagger\left(e^{-i\Delta t'} - 1\right)\right] \\
&= \frac{\beta^2}{i\Delta}\int_0^t dt' \Big[\hat{A}^2 e^{2i\Delta t'} - \hat{A}^2 e^{i\Delta t'} - \hat{A}^{\dagger 2} e^{-2i\Delta t'} + \hat{A}^{\dagger 2} e^{-i\Delta t'} \\
&+ \hat{A}^\dagger \hat{A}(1 - e^{-i\Delta t'}) - \hat{A}\hat{A}^\dagger(1 - e^{i\Delta t'})\Big]
\end{aligned} \tag{498}$$

The third-oder term also becomes

$$\int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\rm IP}(t'') \int_0^{t''} dt''' \hat{H}_{\rm IP}(t''')$$

$$= \frac{\beta^2}{i\Delta} \int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \int_0^{t'} dt'' \left[\hat{A} e^{i\Delta t''} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t''}\right] \times \left[\hat{A}\left(e^{i\Delta t''} - 1\right) - \hat{A}^\dagger \left(e^{-i\Delta t''} - 1\right)\right]$$

$$= \frac{\beta^2}{i\Delta} \int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \int_0^{t'} dt'' \Bigg[\hat{A}^2 e^{2i\Delta t''} - \hat{A}^2 e^{i\Delta t''} - \hat{A}^{\dagger 2} e^{-2i\Delta t''} + \hat{A}^{\dagger 2} e^{-i\Delta t''}$$

$$+ \hat{A}^\dagger \hat{A}(1 - e^{-i\Delta t''}) - \hat{A}\hat{A}^\dagger (1 - e^{i\Delta t''})\Bigg]$$

$$= \frac{\beta^2}{i\Delta} \int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \Bigg[\hat{A}^2 \frac{(e^{2i\Delta t'} - 1)}{2i\Delta} - \hat{A}^2 \frac{(e^{i\Delta t'} - 1)}{i\Delta} - \hat{A}^{\dagger 2} \frac{(e^{-2i\Delta t'} - 1)}{-2i\Delta} + \hat{A}^{\dagger 2} \frac{(e^{-i\Delta t'} - 1)}{-i\Delta}$$

$$+ \hat{A}^\dagger \hat{A} t - \hat{A}^\dagger \hat{A} \frac{(e^{-i\Delta t'} - 1)}{-i\Delta} - \hat{A}\hat{A}^\dagger t + \hat{A}\hat{A}^\dagger \frac{(e^{i\Delta t'} - 1)}{i\Delta}\Bigg]$$

$$= \frac{\beta^2}{(i\Delta)^2} \int_0^t dt' \hat{H}_{\rm IP}(t') \Bigg[\frac{1}{2}\hat{A}^2 (e^{2i\Delta t'} - 1) - \hat{A}^2 (e^{i\Delta t'} - 1) + \frac{1}{2}\hat{A}^{\dagger 2}(e^{-2i\Delta t'} - 1) - \hat{A}^{\dagger 2}(e^{-i\Delta t'} - 1)$$

$$+ \hat{A}^\dagger \hat{A} t + \hat{A}^\dagger \hat{A}(e^{-i\Delta t'} - 1) - \hat{A}\hat{A}^\dagger t + \hat{A}\hat{A}^\dagger (e^{i\Delta t'} - 1)\Bigg]$$

$$= \frac{\beta^3}{(i\Delta)^2} \int_0^t dt' \left[\hat{A} e^{i\Delta t'} + \hat{A}^\dagger e^{-i\Delta t'}\right] \times \Bigg[\frac{1}{2}\hat{A}^2 (e^{2i\Delta t'} - 1) - \hat{A}^2 (e^{i\Delta t'} - 1) + \frac{1}{2}\hat{A}^{\dagger 2}(e^{-2i\Delta t'} - 1) - \hat{A}^{\dagger 2}(e^{-i\Delta t'} - 1)$$

$$+ \hat{A}^\dagger \hat{A} t + \hat{A}^\dagger \hat{A}(e^{-i\Delta t'} - 1) - \hat{A}\hat{A}^\dagger t + \hat{A}\hat{A}^\dagger (e^{i\Delta t'} - 1)\Bigg] \tag{499}$$

$$I_3 = \frac{\beta^3}{(i\Delta)^2}\int_0^t dt'\Bigg[\frac{1}{2}\hat{A}^3(e^{3i\Delta t'}-e^{i\Delta t'}) - \hat{A}^3(e^{2i\Delta t'}-e^{i\Delta t'}) + \frac{1}{2}\hat{A}\hat{A}^{\dagger 2}(e^{-i\Delta t'}-e^{i\Delta t'}) - \hat{A}\hat{A}^{\dagger 2}(1-e^{i\Delta t'})$$

$$+\hat{A}\hat{A}^\dagger\hat{A}te^{i\Delta t'} + \hat{A}\hat{A}^\dagger\hat{A}(1-e^{i\Delta t'}) - \hat{A}^2\hat{A}^\dagger te^{i\Delta t'} + \hat{A}^2\hat{A}^\dagger(e^{2i\Delta t'}-e^{i\Delta t'})\Bigg]$$

$$+\Bigg[\frac{1}{2}\hat{A}^\dagger\hat{A}^2(e^{i\Delta t'}-e^{-i\Delta t'}) - \hat{A}^\dagger\hat{A}^2(1-e^{-i\Delta t'}) + \frac{1}{2}\hat{A}^{\dagger 3}(e^{-3i\Delta t'}-e^{-i\Delta t'}) - \hat{A}^{\dagger 3}(e^{-2i\Delta t'}-e^{-i\Delta t'})$$

$$+\hat{A}^{\dagger 2}\hat{A}te^{-i\Delta t'} + \hat{A}^{\dagger 2}\hat{A}(e^{-2i\Delta t'}-e^{-i\Delta t'}) - \hat{A}^\dagger\hat{A}\hat{A}^\dagger te^{-i\Delta t'} + \hat{A}^\dagger\hat{A}\hat{A}^\dagger(1-e^{-i\Delta t'})\Bigg] \tag{500}$$

t' に関する積分を実行すると，terms of g^2/Δ^2 に関する項が出てくるが，detuning が十分大きい場合にはこれらの項は小さくなり無視できる．Thus we obtain

$$\int_0^t dt'\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t')\int_0^{t'} dt''\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t'') \simeq \frac{i\hbar^2 g^2}{\Delta}t[\hat{A},\hat{A}^\dagger] \tag{501}$$

ここで，$\hat{A} = |0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|$ である．

Thus to second order time evolution operator we have

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{g}{\Delta}[\hat{A}(e^{i\Delta t}-1) - \hat{A}^\dagger(e^{-i\Delta t}-1)] - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger]. \tag{502}$$

もし，平均光子数 $\langle\hat{A}\rangle \simeq (\langle\hat{A}^\dagger\hat{A}\rangle)^{1/2}$ が小さく，

$$\left|\frac{g}{\Delta}(\langle\hat{A}^\dagger\hat{A}\rangle)^{1/2}\right| \ll 1 \tag{503}$$

If the mean excitation A is not large and if B, assumed vaild because of the large detuning, then the second term of Eq. 1.

平均励起 A が大きくなく、B の場合、離調が大きいために有効であると想定される場合、式（1）の第 2 項は次のようになります。 1.1。

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\hat{H}_{\mathrm{IP}}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\mathrm{eff}}t, \tag{504}$$

where

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger]. \tag{505}$$

For our model we have $\hat{A} = |0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|$ so that

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = \frac{\beta^2}{\Delta}\Big[|0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 4| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 0| - 2|2\rangle\langle 2|\Big] \tag{506}$$

where we have

$$
\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] &= \Big[|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2|, |2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4| \Big] \\
&= \Big(|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2| \Big)\Big(|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4| \Big) - \Big(|2\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 4| \Big)\Big(|0\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 2| \Big) \\
&= \Big(|0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 4| \Big) - 2\,|2\rangle\langle 2| \qquad (507)
\end{aligned}
$$

また，ここで，次の Bright state と Dark state を定義する：

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |4\rangle) \qquad (508)$$

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |4\rangle) \qquad (509)$$

すると，上で求めた有効 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \frac{2\beta^2}{\Delta}\Big[|B\rangle\langle B| - |2\rangle\langle 2| \Big] \qquad (510)$$

where we use

$$2\,|B\rangle\langle B| = |0\rangle\langle 0| + |4\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 4| \qquad (511)$$

12.3 Dispersive Shift

Here we introduce a model of a mode coupled with a qubit. The total Hamiltonian then is given by

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}, \qquad (512)$$

where $\hat{H}_0$ is the non-perturbative Hamiltonian and $\hat{H}_{\mathrm{I}}$ is the interaction Hamiltonian. ここで相互作用 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\mathrm{I}} = \hbar g(\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \qquad (513)$$

と書く. where $\hat{A}$ and g denote the product of operators describing the interaction, and the coupling constant, respectively. Here we take $\hat{A} = \hat{a}\hat{\sigma}_+$, and we consider the following interaction Hamiltonian

$$\hat{H}_{\mathrm{I}} = \hbar g(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-) \qquad (514)$$

and

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z. \qquad (515)$$

The timed-dependent Schrödinger equation in the Schrödinger picture(SP) is

$$i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle = \Big(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{I}}\Big)\,|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle \qquad (516)$$

where $|\psi_{\mathrm{SP}}(t)\rangle$ is the state vector in the SP.

We now can transform out of the interaction picture (IP) using the transformation

$$\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} = e^{-i\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} t} \otimes e^{-i\omega_0 \hat{\sigma}_z t/2} \tag{517}$$

The state vector in the IP is given by

$$|\psi_{\text{IP}}(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger |\psi_{\text{SP}}(t)\rangle \tag{518}$$

and the SchÖdinger equation in the IP becomes

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\text{IP}}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{I}}\right) |\psi_{\text{IP}}(t)\rangle \,, \tag{519}$$

where

$$\hat{H}_{\text{IP}}(t) = \hat{U}_0^\dagger \hat{H} \hat{U}_0 - i\hbar \hat{U}_0^\dagger \frac{d}{dt} \hat{U}_0 \tag{520}$$

$$= \hat{H}_0 + \hbar g \left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ e^{i(\omega_0-\omega)t} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- e^{-i(\omega_0-\omega)t}\right) - i\hbar \hat{U}_0^\dagger \left(-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}\right) \hat{U}_0 \tag{521}$$

$$= \hbar g \left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ e^{i(\omega_0-\omega)t} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- e^{-i(\omega_0-\omega)t},\right) \tag{522}$$

where $\Delta = \omega_0 - \omega$ is the detuning of the field and the atom.

Also, we use the following relation

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{a} \hat{U}_0 = \hat{a} e^{-i\omega t} \tag{523}$$

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{U}_0 = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}, \tag{524}$$

and

$$\hat{U}_0^\dagger \hat{\sigma}_\pm \hat{U}_0 = \hat{\sigma}_\pm e^{\pm i\omega t}. \tag{525}$$

The detuning will be assumed large, $\Delta \gg 1$.

The solution to Eq. (**??**) can be written formally as

$$|\psi_{\text{IP}}(t)\rangle = \hat{\mathcal{T}} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{\text{IP}}(t')\right)\right] |\psi_{\text{IP}}(0)\rangle \,. \tag{526}$$

We make the pertubation expansion

$$\begin{aligned} &\hat{\mathcal{T}} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{\text{IP}}(t')\right)\right] \\ &= \hat{\mathcal{T}} \left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{\text{IP}}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\text{IP}}(t') \hat{H}_{\text{IP}}(t'')\right] \\ &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{\text{IP}}(t') + \frac{(-i)^2}{2!\hbar^2} \int_0^t dt' \hat{\mathcal{T}} \left[\int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\text{IP}}(t') \hat{H}_{\text{IP}}(t'')\right] \end{aligned} \tag{527}$$

The second term in Eq.(527) yields

$$\int_0^t dt' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t') = \int_0^t dt' \left[\hbar g \left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ e^{i\Delta t'} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- e^{-i\Delta t'}\right)\right]$$

$$= \hbar g \left[\hat{a}\hat{\sigma}_+ \frac{e^{i\Delta t'}}{i\Delta} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- \frac{e^{i\Delta t'}}{-i\Delta}\right]_0^t$$

$$= \frac{\hbar g}{i\Delta}\left[\hat{a}\hat{\sigma}_+\left(e^{i\Delta t} - 1\right) - \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_-\left(e^{i\Delta t} - 1\right)\right] \tag{528}$$

The second-oder term now becomes

$$\int_0^t dt' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t') \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t'') = \frac{\hbar^2 g^2}{i\Delta} \int_0^t dt' \left[\hat{a}\hat{\sigma}_+ e^{i\Delta t'} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- e^{-i\Delta t'}\right] \times \left[\hat{a}\hat{\sigma}_+ \left(e^{i\Delta t'} - 1\right) - \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- \left(e^{i\Delta t'} - 1\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2 g^2}{i\Delta} \int_0^t dt' \Bigg[\hat{a}^2 \hat{\sigma}_+^2 e^{2i\Delta t'} - \hat{a}^2 \hat{\sigma}_+^2 e^{i\Delta t'} - \hat{a}^{\dagger 2} \hat{\sigma}_-^2 e^{-2i\Delta t'} + \hat{a}^{\dagger 2} \hat{\sigma}_+^2 e^{-i\Delta t'}$$

$$+ \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_+ (1 - e^{-i\Delta t'}) - \hat{a}\hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- (1 - e^{i\Delta t'})\Bigg] \tag{529}$$

t' に関する積分を実行すると，terms of g^2/Δ^2 に関する項が出てくるが，detuning が十分大きい場合にはこれらの項は小さくなり無視できる．Thus we obtain

$$\int_0^t dt' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t') \int_0^{t'} dt'' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t'') \simeq \frac{i\hbar^2 g^2}{\Delta} t [\hat{A}, \hat{A}^\dagger] \tag{530}$$

ここで，$\hat{A} = \hat{a}\hat{\sigma}_+$ である．

Thus to second order time evolution operator we have

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{g}{\Delta}[\hat{A}(e^{i\Delta t} - 1) - \hat{A}^\dagger (e^{-i\Delta t} - 1)] - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]. \tag{531}$$

もし，平均光子数 $\langle \hat{A} \rangle \simeq (\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle)^{1/2}$ が小さく，

$$\left|\frac{g}{\Delta}(\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle)^{1/2}\right| \ll 1 \tag{532}$$

If the mean excitation A is not large and if B, assumed vaild because of the large detuning, then the second term of Eq. 1.

平均励起 A が大きくなく、B の場合、離調が大きいために有効であると想定される場合、式（1）の第 2 項は次のようになります。 1.1。

$$\hat{\mathcal{T}}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \hat{H}_{\mathrm{IP}}(t')\right)\right] \simeq \hat{1} - \frac{ig^2 t}{\Delta}[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\mathrm{eff}} t, \tag{533}$$

where

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]. \tag{534}$$

For the Jaynes-Cumings interaction we have $\hat{A} = \hat{a}\hat{\sigma}_+$ so that

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hbar g^2}{\Delta}(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\sigma}_z), \tag{535}$$

where we have

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = [\hat{a}\hat{\sigma}_+, \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-] &= \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+ \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+ \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{a}\hat{a}^\dagger(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+) \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{a}\hat{a}^\dagger(|e\rangle\langle g|g\rangle\langle e| - |g\rangle\langle e|e\rangle\langle g|) \\
&= \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_z
\end{aligned} \tag{536}$$

参考文献