量子力学 II 演習 問題 (第 9回)

樋口 さぶろお*

1998 年 6 月 24 日

摂動論の公式集

縮退のない場合　非摂動 Hamiltonian を H_0, その固有関数, エネルギー固有値を$\psi_1, \psi_2, \ldots,$ $E_1 < E_2 < \cdots$ とする. 摂動をうけた Hamiltonian を $H = H_0 + \lambda V$ とすると, その固有関数 ϕ_n, エネルギー固有値 W_n は, λ に関する巾級数として,

$$W_n = E_n + \lambda \langle \psi_n | V | \psi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n | V | \psi_k \rangle \langle \psi_k | V | \psi_n \rangle}{E_n - E_k} + \cdots, \quad (1)$$

$$\phi_n = \psi_n + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k | V | \psi_n \rangle}{E_n - E_k} \psi_k + \lambda^2 \times (\text{ 複雑 }) + \cdots \quad (2)$$

(ほとんど) 縮退のある場合　非摂動 Hamiltonian を H_0, その固有関数, エネルギー固有値を$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_a, \psi_{a+1}, \ldots,$ $E_1 < E_2 < \cdots < E_a \approx E_{a+1} < \cdots$ とする. 摂動をうけた Hamiltonian を $H = H_0 + \lambda V$ とすると, $a, a+1$ に対応する 固有関数 ϕ_n, エネルギー固有値 W_n は, λ に関する巾級数として,

$$W_a = W_a^{(0)} + \lambda W_a^{(1)} + \lambda^2 \sum_{k \neq a, a+1} \frac{\left\langle \phi_a^{(0)} | V | \psi_k \right\rangle \left\langle \psi_k | V | \phi_a^{(0)} \right\rangle}{W_a^{(0)} - E_k} + \cdots, \quad (3)$$

$$\phi_a = \phi_a^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq a, a+1} \frac{\left\langle \psi_k | V | \phi_a^{(0)} \right\rangle}{W_a^{(0)} - E_k} \psi_k + \lambda^2 \times (\text{複雑}) + \cdots. \quad (4)$$

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, Room: Komaba 16-809B, Phone: (03)54.54.67.35

ただし, $\phi_a^{(0)}, W_a^{(0)}+\lambda W_a^{(1)}, \phi_{a+1}^{(0)}, W_{a+1}^{(0)}+\lambda W_{a+1}^{(1)}$ は, ψ_a と ψ_{a+1} の間で対角化を行なって決める.

1 次の摂動のもとで縮退が残る場合には別の考察が必要.

[9-1] Square well ポテンシャルに対する摂動

1 次元のポテンシャル

$$V(x)=\begin{cases} +\infty & (x<0, x>L) \\ \lambda V_0 & (0<x<L/4) \\ 0 & (L/4<x<L) \end{cases} \tag{5}$$

のもとでのエネルギー準位を, λ についての摂動の 1 次で求めよ.

[9-2] 1 次元調和振動子に対する摂動

1 次元の調和振動子 $H=p^2/2m+m\omega^2x^2/2$ に摂動

1. λx 2. $\dfrac{1}{2}\lambda x^2$

がくわわった. 摂動論の 1 次および 2 次でエネルギー固有値を求めよ. また, 摂動を用いずに厳密に解いた結果と比較せよ.

Hint. 行列要素の計算には, 生成消滅演算子を用いるとよい.

[9-3] 縮退のない場合の摂動論

2 つの エネルギー固有状態を持つ系に対する摂動を考える. 無摂動状態の固有関数を基底にとったとき, 摂動をうけた系の Hamiltonian 行列を

$$H=H_0+\lambda V=\begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}+\lambda\begin{pmatrix} 0 & a \\ a^* & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

とする. ただしλ は摂動パラメタ.

1. $|E_1-E_2| \gg |\lambda a|$ と仮定すると, 縮退のない場合の摂動論が使える. 摂動を受けた系のエネルギー固有値を, 摂動の 1 次, および 2 次で求めよ. 摂動を受けた系の固有関数を, 摂動の 1 次で求めよ.

2. 摂動を受けた系の Hamiltonian を厳密に対角化し, エネルギー固有値と固有関数を求めよ.
   摂動論の結果を厳密解と比較せよ.

Hint. 比較するには, $|\lambda a|/|E_1 - E_2| \ll 1$ で展開する.

[9-4] **縮退のある場合の摂動論**

上の問題で,

1. $E_1 = E_2$ の場合 (厳密には $|E_1 - E_2| \ll |\lambda a|$ の場合も), 縮退のある場合の摂動論を用いなくてはならない. エネルギー準位を摂動の 1 次, 2 次で求めよ. 固有関数を摂動の 0 次, 1 次で求めよ.
2. 上の結果を厳密解と関係づけよ.