量子力学 II 演習問題［第 12 回］提出の必要なし

非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有状態と固有エネルギーを $|n\rangle_0$ と $E_n^{(0)}$ とし（つまり $\hat{H}_0 |n\rangle_0 = E_n^{(0)} |n\rangle_0$）、固有エネルギーに縮退はないとする。固有状態は規格直交化（つまり ${}_0\langle m|n\rangle_0 = \delta_{mn}$）されており、完全である（つまり $\sum_m |m\rangle_0 \, {}_0\langle m| = \hat{1}$）。摂動項 $\lambda\hat{V}$ を加えたハミルトニアン $\hat{H}$ とシュレディンガー方程式は

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}, \quad \hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle$$

で与えられる。$|n\rangle$ と E_n は厳密な固有状態と固有エネルギーであり、λ のべきで展開される：

$$|n\rangle = |n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \cdots, \quad E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

$\boldsymbol{m}$ と $\boldsymbol{n}$ の区別に注意して次の問に答えよ。

1. 任意の状態 $|\phi\rangle$ が非摂動ハミルトニアンの固有状態 $|m\rangle_0$ の線形結合で書けることを示せ。

2. シュレディンガー方程式に $|n\rangle$ と E_n の展開を代入し、λ^1 と λ^2 の係数から次の式を示せ。

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}_0)|n\rangle_1 = (\hat{V} - E_n^{(1)})|n\rangle_0 \tag{1}$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}_0)|n\rangle_2 = (\hat{V} - E_n^{(1)})|n\rangle_1 - E_n^{(2)}|n\rangle_0 \tag{2}$$

3. 式 (1) に左から ${}_0\langle m|$ をかけて次の式を示せ。

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})\,{}_0\langle m|n\rangle_1 = {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0 - E_n^{(1)}\delta_{mn}$$

4. 3. の結果で $m = n$ とすることで、1 次の摂動での固有エネルギーのずれ $E_n^{(1)}$ を求めよ。

5. 3. の結果で $m \neq n$ として ${}_0\langle m|n\rangle_1$ を計算し、状態 $|n\rangle_1$ を $|m\rangle_0$ の線形結合で表せ。ただし ${}_0\langle n|n\rangle_1 = c$ とする。

6. 式 (2) に左から ${}_0\langle n|$ をかけて 2 次の摂動での固有エネルギーのずれ $E_n^{(2)}$ を $|n\rangle_0$、$\hat{V}$、$E_n^{(1)}$、$|n\rangle_1$ を用いて表せ。

7. 4.、5.、6. の結果を用いて $E_n^{(2)}$ を $\hat{V}$ と非摂動ハミルトニアンの固有状態と固有エネルギーで表せ。

8. 基底状態に対する 2 次の摂動が 0 または負になることを示せ。
