【縮退のある系の摂動論】

ハミルトニアン H が，固有値・固有状態が分かっている H_0 と，摂動項 ϵV で表されているとする。

$$H = H_0 + \epsilon V.$$

$\epsilon \to 0$ の極限において H の固有値 $E_n(\epsilon)$ は H_0 の固有値 E_n になり，対応する固有状態 $|\psi_n\rangle\!\rangle$ は H_0 の固有状態 $|\psi_n^{(0)}\rangle$（の線形結合）に近づくので，

$$E_n(\epsilon) = E_n + \epsilon E_n^{(1)} + \cdots, \quad |\psi_n\rangle\!\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \epsilon|\psi_n^{(1)}\rangle + \cdots,$$

と展開できる。これらを用いて

$$H|\psi_n\rangle\!\rangle = E_n(\epsilon)|\psi_n\rangle\!\rangle$$

を ϵ の次数で整理すると，ϵ の一次まででは

$$H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n|\psi_n^{(0)}\rangle, \tag{1}$$

$$H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + V|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n|\psi_n^{(1)}\rangle, \tag{2}$$

という式が得られる。

H_0 の固有値 E_n に縮退がある場合に H の固有値・固有状態を近似的に求める方法を，以下では具体的な例を通じて調べる。H_0, V が 3×3 行列により，それぞれ

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & a \\ 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

と与えられているとする。ただし a は実定数とする。H_0 の固有値は $1, 1, 2$ であり，対応する固有状態はそれぞれ

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

である。よって，H_0 の固有値 1 に対応する固有状態には 2 つの状態 $|1\rangle, |2\rangle$ がある（縮退している）。ベクトル $|1\rangle, |2\rangle$ の選び方には任意性があり，一般の固有状態は係数 c_1, c_2 を用いた任意の線形結合

$$|\psi_1^{(0)}\rangle = c_1\,|1\rangle + c_2\,|2\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

で与えられる。

ここで，H_0 の固有状態により構成される空間 $\mathcal{H}$ を，その固有値 E_n に応じて

$$\mathcal{H}_n = \{|n, \alpha\rangle;\ H_0|n, \alpha\rangle = E_n|n, \alpha\rangle\}$$

と分割する。ただし，$|n, \alpha\rangle$ は正規直交であるとし，E_n が縮退している場合には、対応する固有状態は α により区別されているとする。つまり，$E_1 = 1, E_2 = 2$ に対して

$$\mathcal{H}_1 = \{|1, 1\rangle,\, |1, 2\rangle\}\,, \quad \mathcal{H}_2 = \{|2, 1\rangle\}\,,$$

であり，上の $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ を用いると

$$|1\rangle = |1,1\rangle, \quad |2\rangle = |1,2\rangle, \quad |3\rangle = |2,1\rangle,$$

となる。空間 $\mathcal{H}_n$ への射影演算子

$$\mathcal{P}_n = \sum_\alpha |n,\alpha\rangle\langle n,\alpha|$$

は以下のようになる。

$$\mathcal{P}_1 = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{P}_2 = |3\rangle\langle 3| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

(1) 式 (2) に $\mathcal{P}_n, 1-\mathcal{P}_n$ を作用させることで，（H_0, V の具体的な形を用いずに）以下を導け。

$$E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \mathcal{P}_n V \mathcal{P}_n |\psi_n^{(0)}\rangle, \tag{3}$$

$$(E_n - H_0)(1-\mathcal{P}_n)|\psi_n^{(1)}\rangle = (1-\mathcal{P}_n) V |\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{4}$$

(2) 式 (3), (4) を，H_0, V の具体的な形を用いて書き下せ。また，得られた式から $E_1^{(1)}$ と c_1, c_2 を求めよ。さらに，

$$|\psi_1^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

と表すとき，どの成分を決めることができるかを説明し，その成分を求めよ。