物理学演習 III (量子力学)　　No.7　　2016. 6. 14

1. 【時間によらない摂動論（後半）】

全体のハミルトニアン H が，無摂動ハミルトニアン H_0 と摂動相互作用 V によって，

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

と書けているとする。ただし，H_0 には縮退がないとする。その場問題 No. 7 と同様に，固有値 $E_n(\epsilon)$ とその固有状態 $|\,\psi_n(\epsilon)\,\rangle$ をベキ展開

$$E_n(\epsilon) = \sum_{p=0}^{\infty} \epsilon^p E^{(p)}{}_n = E_n + \epsilon E^{(1)}{}_n + \epsilon^2 E^{(2)}{}_n + \cdots \ ,$$

$$|\,\psi_n(\epsilon)\,\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \epsilon^p |\,\psi_n^{(p)}\,\rangle = |\,n\,\rangle + \epsilon |\,\psi_n^{(1)}\,\rangle + \epsilon^2 |\,\psi_n^{(2)}\,\rangle + \cdots \ ,$$

して，全体のシュレディンガー方程式を解くことを考える。

(1) その場問題 No. 7 の結果から，$|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle$ を求めなさい。一般に，$|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle$ は不定性を含むが，この不定性が満たすべき条件を波動関数の規格化条件から導きなさい。

(2) $E^{(2)}{}_n$ と $|\,\psi_n^{(2)}\,\rangle$ を求めなさい。

(3) $|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle$ と $|\,\psi_n^{(2)}\,\rangle$ が含んでいる不定性が物理量 A の期待値 $\langle\,\psi_n(\epsilon)\,|A|\,\psi_n(\epsilon)\,\rangle$ に影響を与えないことを，ϵ と ϵ^2 のオーダーでそれぞれ示しなさい。

2. 【行列の摂動論】

3×3 行列

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

の固有値を摂動論の考えに沿って求めることにする。ただし、ここで、

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \ , \qquad V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \ ,$$

とする。このとき、H_0 の固有ベクトルは、固有値 $E_1 = 1$, $E_2 = 2$, $E_3 = 3$ のそれぞれに対して、

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

となっていることがわかる。

(1) エネルギーの一次補正 $E_n^{(1)}$ と波動関数の補正 $|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle$ を求めよ。

(2) エネルギーに対する二次の補正項 $E_n^{(2)}$ を求めよ。

3. 【一定の電場における一次元調和振動子】

一次元調和振動子のハミルトニアン

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ ,$$

に摂動項 $eE\,x$ を加えたハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + eE\,x \ ,$$

に対して，eE を摂動のパラメーターと思い，定常状態に対するシュレディンガー方程式を解くことを考える。

H_0 の固有状態 $|\,n\,\rangle$ に対して，$\lambda = eE\sqrt{\hbar/2m\omega}$ として，摂動項による補正を

$$E_n(\lambda) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \ ,$$

$$|\,\psi_n\,\rangle = |\,n\,\rangle + \lambda\,|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle + \lambda^2\,|\,\psi_n^{(2)}\,\rangle + \cdots \ ,$$

と取り入れてゆくことにする。

(1) エネルギーの一次補正 $E_n^{(1)}$ と波動関数の補正 $|\,\psi_n^{(1)}\,\rangle$ を求めよ。

(2) エネルギーに対する二次の補正項 $E_n^{(2)}$ を求めよ。

(3) 座標を

$$X = x + \frac{eE}{m\omega^2}$$

と再定義することで，ハミルトニアン H の厳密な固有エネルギーを求め，摂動論の結果と比較しなさい。