

A-4 縮退のある場合の摂動論

縮退の無い場合と同様に次の問題を考える。

$$(A4.1) \quad \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$(A4.2) \quad \hat{H} = \hat{H}^\circ + \lambda\hat{H}'$$

ただし、無摂動のときの解で、 $n = 1$ と $n = 2$ が縮退しているとする。

$$(A4.3) \quad \hat{H}^\circ\psi_1^\circ = E^\circ\psi_1^\circ$$

$$(A4.4) \quad \hat{H}^\circ\psi_2^\circ = E^\circ\psi_2^\circ$$

$$(A4.5) \quad \hat{H}^\circ\psi_3^\circ = E_3^\circ\psi_3^\circ$$

ここで、 E° の状態は $\psi_1^\circ, \psi_2^\circ$ そのものではなく、2 つの線形結合であることに注意が必要である。

$$(A4.6) \quad \psi^\circ = c_1\psi_1^\circ + c_2\psi_2^\circ$$

摂動を受けると次のように表されたとする。

$$(A4.7) \quad \psi = c_1\psi_1^\circ + c_2\psi_2^\circ + \sum_{k \geq 3} c_k\psi_k^\circ$$

Schrödinger 方程式に代入する。

$$(A4.8) \quad c_1\hat{H}^\circ\psi_1^\circ + c_2\hat{H}^\circ\psi_2^\circ + \sum_{k \geq 3} c_k\hat{H}^\circ\psi_k^\circ + c_1\hat{H}'\psi_1^\circ + c_2\hat{H}'\psi_2^\circ + \sum_{k \geq 3} c_k\hat{H}'\psi_k^\circ = E(c_1\psi_1^\circ + c_2\psi_2^\circ + \sum_{k \geq 3} c_k\psi_k^\circ)$$

ここで $\sum$ の項は摂動による部分なので小さいとして無視する。

左から $\psi_1^{\circ*}$ をかけて積分したものと、 $\psi_2^{\circ*}$ をかけて積分したものを考える。

$$(A4.9) \quad -(E - E^\circ - H'_{11})c_1 + H'_{12}c_2 = 0$$

$$(A4.10) \quad H'_{21}c_2 - (E - E^\circ - H'_{22})c_1 = 0$$

この 2 つの式が c_1, c_2, E を求めるための方程式になる。

$c_1 = c_2 = 0$ にならないためには次の永年方程式を満たさなければならない

$$(A4.11) \quad \begin{vmatrix} -(E - E^\circ - H'_{11}) & H'_{12} \\ H'_{21} & -(E - E^\circ - H'_{22}) \end{vmatrix} = 0$$

$\psi_1^\circ, \psi_2^\circ$ の選び方は規格直交であれば任意なので、 $H'_{11} = H'_{22}$ を満たすように選ぶことにする。

$H'_{12} = H'_{21} > 0$ のとき、エネルギーと波動関数は次のようになる。

$$(A4.12) \quad E = E^\circ + H'_{11} \pm H'_{12}$$

$$(A4.13) \quad \psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^\circ \pm \psi_2^\circ)$$

縮退していたレベルが分裂したことに注意せよ。