高次の摂動論(要約版)

中嶋 慧

December 8, 2024

Abstract

時間に依存しない摂動論の一般論を解説する。

1　加藤の方法

　ハミルトニアンを、

$$H = H_0 + \lambda V \tag{1.1}$$

とかく。H_0 は非摂動ハミルトニアンであり、λ は実数である。$H_0,\ H$ の固有値と固有ベクトルを、

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{1.2}$$
$$H|\psi_n\rangle = \mathcal{E}_n|\psi_n\rangle \tag{1.3}$$

とする。E_j は縮退していないとする。このとき、$\mathcal{E}_j$ を、

$$\mathcal{E}_j = E_j + \lambda\Delta^{(1)} + \lambda^2\Delta^{(2)} + \lambda^3\Delta^{(3)} + \cdots \tag{1.4}$$

と展開したい。

　[1] に従い、加藤敏夫の方法 (1949) を解説する。以下、しばらくは固有値が縮退していても良い。H の固有値 $\mathcal{E}_i$ の部分空間への射影演算子を $\mathcal{P}_i$ とする：

$$H\mathcal{P}_i = \mathcal{E}_i\mathcal{P}_i. \tag{1.5}$$

また、

$$\mathcal{G}(z) :=\ (z - H)^{-1} \tag{1.6}$$

とすると、

$$\mathcal{G}(z)\mathcal{P}_i = \frac{\mathcal{P}_i}{z - \mathcal{E}_i} \tag{1.7}$$

である。従って、

$$\mathcal{G}(z) = \sum_i \frac{\mathcal{P}_i}{z - \mathcal{E}_i} \tag{1.8}$$

である。これより、

$$\mathcal{P}_j = \frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_j} dz\ \mathcal{G}(z) \tag{1.9}$$

となる。Γ_j は $\mathcal{E}_j$ の周りを 1 周し、他の $\mathcal{E}_k$ は含まないとする。上式より、

$$H\mathcal{P}_j = \frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_j} dz\ z\mathcal{G}(z) \tag{1.10}$$

を得る。ただし、$(z-H)\mathcal{G}(z)=1$ より、$H\mathcal{G}(z)=z\mathcal{G}(z)-1$ と

$$\int_{\Gamma_j} dz\ 1 = 0 \tag{1.11}$$

を用いた。

いま、

$$\mathcal{G}_0(z) := \frac{1}{z-H_0} \tag{1.12}$$

とする。恒等式

$$\begin{aligned}\frac{1}{z-H_0-\lambda V} &= \frac{1}{z-H_0}[z-H_0-\lambda V+\lambda V]\frac{1}{z-H_0-\lambda V}\\ &= \frac{1}{z-H_0}+\frac{1}{z-H_0}\lambda V\frac{1}{z-H_0-\lambda V}\end{aligned} \tag{1.13}$$

より、

$$\mathcal{G}(z) = \mathcal{G}_0(z)[1+\lambda\mathcal{G}(z)] \tag{1.14}$$

を得る。これより、

$$\mathcal{G}(z) = \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\mathcal{G}_0(z)[V\mathcal{G}_0(z)]^n \tag{1.15}$$

が得られる。これと (1.10) より、

$$\mathcal{P}_j = P_j + \sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n A^{(n)}, \tag{1.16}$$

$$A^{(n)} := \frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_j} dz\ \mathcal{G}_0(z)[V\mathcal{G}_0(z)]^n \tag{1.17}$$

である。P_j は H_0 の固有値 E_j の部分空間への射影演算子である。ここで、Γ_j は E_j のみを囲み、他の E_k は囲まないと仮定した (摂動の効果で E_j の縮退が解ける場合は、それら全てを囲むとする) 。これは λ が十分小さい時には可能である。さて、

$$\mathcal{G}_0(z) = \frac{P_j+Q_j}{z-H_0}, \quad Q_j := 1-P_j \tag{1.18}$$

である。ここで、

$$
\begin{aligned}
\frac{Q_j}{z-H_0} &= \sum_{i(\neq j)} \frac{P_i}{z-E_i} \\
&= \sum_{i(\neq j)} \frac{P_i}{E_j - E_i + (z-E_i)} \\
&= \sum_{i(\neq j)} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1}(z-E_i)^{k-1} \frac{P_i}{(E_j-E_i)^k} \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1}(z-E_i)^{k-1} G^k
\end{aligned}
\tag{1.19}
$$

である。ただし、

$$
G := Q_j \mathcal{G}_0(E_j) Q_j = \sum_{i(\neq j)} \frac{P_i}{E_j - E_i} \tag{1.20}
$$

である。いま、

$$
S^0 := -P, \quad S^k := G^k \quad (k \geq 1) \tag{1.21}
$$

とする。ただし、P は P_j である。すると、

$$
\mathcal{G}_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-1}(z-E_i)^{k-1} S^k \tag{1.22}
$$

となる。従って、

$$
A^{(n)} = -\sum_{(n)}^{(n+1)} S^{k_1} V S^{k2} V \cdots V S^{k_{n+1}} \tag{1.23}
$$

である。ここで、$\sum_{(p)}^{(n)}$ は、

$$
k_1 + k_2 + \cdots + k_n = p, \quad k_i \geq 0 \tag{1.24}
$$

を満たす非負の整数の組についての和である。

(1.10) を用いて同様に計算し、

$$
(H - E_j)\mathcal{P} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n B^{(n)}, \tag{1.25}
$$

$$
B^{(n)} = \sum_{(n-1)}^{(n+1)} S^{k_1} V S^{k2} V \cdots V S^{k_{n+1}} \tag{1.26}
$$

を得る。

特に E_j が縮退していないとき、$\mathcal{P}|j\rangle$ が H の固有ベクトルである。$H\mathcal{P} = E_j\mathcal{P}$ と $\mathrm{Tr}[\mathcal{P}] = \mathrm{Tr}[P] = 1$ より、

$$\mathcal{E}_j = E_j + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathrm{Tr}[B^{(n)}] \tag{1.27}$$

となる。すなわち、

$$\Delta^{(n)} = \mathrm{Tr}[B^{(n)}] \tag{1.28}$$

である。

2 Bloch の方法

いま、

$$K := P\mathcal{P}P \tag{2.1}$$

とし、

$$\mathcal{P}P = UK, \quad UP = U \tag{2.2}$$

により U を定める。ここで、

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n U^{(n)}, \tag{2.3}$$

$$K = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n K^{(n)}, \tag{2.4}$$

$$\mathcal{P}P = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n T^{(n)} \tag{2.5}$$

と置くと、

$$\begin{aligned} T^{(n)} &= A^{(n)}P \\ &= \sum_{(n)}^{(n)} S^{k_1}VS^{k2}V\cdots S^{k_n}VP =: \sum_{(n)}^{(n)} S_{[n]} \quad (n \geq 1) \end{aligned} \tag{2.6}$$

である。$T^{(0)} = P$ である。また、

$$\begin{aligned} K^{(n)} &= PA^{(n)}P \\ &= -\sum_{(n)}^{(n-1)} PVS^{k_1}V\cdots S^{k_{n-1}}VP = -\sum_{(n)}^{(n-1)} PVS_{[n-1]} \quad (n \geq 2) \end{aligned} \tag{2.7}$$

である。$K^{(0)} = P,\ K^{(1)} = 0$ である。また、

$$U^{(0)} = P \tag{2.8}$$

である。さて、

$$UK = P + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \Big[U^{(n)} + K^{(n)} + \sum_{k+l=n}^{k\geq 1, l\geq 2} U^{(k)} K^{(l)} \Big] \tag{2.9}$$

である。これより、

$$T^{(n)} = U^{(n)} + K^{(n)} + \sum_{k+l=n}^{k\geq 1, l\geq 2} U^{(k)} K^{(l)} \tag{2.10}$$

であり、

$$U^{(1)} = GVP \tag{2.11}$$

である。また、

$$T^{(2)} = -PVG^2VP + GVGVP - G^2VPVP, \tag{2.12}$$

$$K^{(2)} = -PVG^2VP \tag{2.13}$$

より、

$$U^{(2)} = GVGVP - G^2VPVP \tag{2.14}$$

である。また、

$$\begin{aligned} T^{(3)} = &\ PVPVG^3VP - PVGVG^2VP - PVG^2VGVP + PVG^3VPVP \\ &- GVPVG^2VP + GVGVGVP - GVG^2VPVP - G^2VPVGVP \\ &- G^2VGVPVP + G^3VPVPVP, \end{aligned} \tag{2.15}$$

$$K^{(3)} = PVPVG^3VP - PVGVG^2VP - PVG^2VGVP + PVG^3VPVP \tag{2.16}$$

より、

$$\begin{aligned} U^{(3)} = &\ GVGVGVP - GVG^2VPVP - G^2VPVGVP \\ &- G^2VGVPVP + G^3VPVPVP \end{aligned} \tag{2.17}$$

である。

一般に、

$$U^{(n)} = \sum_{(n)}{}' S^{k_1} V S^{k2} V \cdots S^{k_n} V P \tag{2.18}$$

である。ここで、$\sum'_{(n)}$ は、

$$k_1 + k_2 + \cdots + k_p \geq p, \quad (p = 1, 2, \cdots, n-1) \tag{2.19}$$
$$k_1 + k_2 + \cdots + k_n = n \tag{2.20}$$

を満たす非負の整数の組ついての和である。

E_j に縮退がない時は、

$$\mathcal{E}_j = \langle j|HU|j\rangle \tag{2.21}$$

となる。実際、(2.2) より、

$$\mathcal{E}_j \mathcal{P} P = H\mathcal{P}P = HUP\mathcal{P}P \tag{2.22}$$

なので、このトレースを取ると、

$$\mathcal{E}_j \langle j|\mathcal{P}|j\rangle = \langle j|HU|j\rangle\langle j|\mathcal{P}|j\rangle \tag{2.23}$$

となり、(2.21) を得る。(2.21) より、

$$\Delta^{(n+1)} = \sum_{(n)}{}' \langle VS^{k_1}VS^{k2}V\cdots S^{k_n}V\rangle \tag{2.24}$$

を得る。$\Delta^{(n)}$ の項の数は、

$$N_n = \frac{(2n-2)!}{n!(n-1)!} \tag{2.25}$$

で、

$$N_4 = 5, \tag{2.26}$$
$$N_5 = 14, \tag{2.27}$$
$$N_6 = 42, \tag{2.28}$$
$$N_7 = 132 \tag{2.29}$$

である。

論文 [2, 3] には n 次摂動のエネルギーを求める簡単なルールが載っている。

4 次までの摂動をまとめると、

$$\Delta^{(1)} = \langle V\rangle, \tag{2.30}$$
$$\Delta^{(2)} = \langle VGV\rangle, \tag{2.31}$$
$$\begin{aligned}\Delta^{(3)} &= \langle VGVGV\rangle - \langle V\rangle\langle VG^2V\rangle \\ \Delta^{(4)} &= \langle VGVGVGV\rangle - \langle VGV\rangle\langle VG^2V\rangle + \langle V\rangle^2\langle VG^3V\rangle \\ &\quad - \langle V\rangle[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle]\end{aligned} \tag{2.32}$$

となる。5 次の摂動は、

$$\begin{aligned}\Delta^{(5)} = &\langle VGVGVGVGV\rangle - \langle VG^2V\rangle\langle VGVGV\rangle - \langle VGV\rangle[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\ &+ \langle V\rangle[\langle VG^2V\rangle^2 - \langle VG^2VGVGV\rangle - \langle VGVG^2VGV\rangle - \langle VGVGVG^2V\rangle] \\ &+ 2\langle V\rangle\langle VGV\rangle\langle VG^3V\rangle + \langle V\rangle^2[\langle VG^3VGV\rangle + \langle VG^2VG^2V\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\ &- \langle V\rangle^3\langle VG^4V\rangle \end{aligned} \tag{2.33}$$

である。6 次と 7 次の摂動はノート [4] に載っている。

References

[1] メシア (著), 小出 昭一郎・田村 二郎 (翻訳)『メシア量子力学 3』東京図書, 1972 年.

[2] R. Huby, “Formulae for Non-degenerate Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory in any order”, Proc. Phys. Soc. **78**, 529 (1961).

[3] B. Y. Tong, “On Huby’s Rules for Non-degenerate Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory in any Order”, Proc. Phys. Soc. **80**, 1101 (1962).

[4] 中嶋慧「高次摂動論」
`http://physnakajima.html.xdomain.jp/higher_perturbation.pdf`