固有状態が 2 つしかない系（2 準位系）において，2 つの状態間に相互作用がない場合のエネルギーがそれぞれ $\varepsilon_1, \varepsilon_2 (\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$ であり、相互作用の強さが V である場合，シュレーディンガー方程式 (固有値方程式) は

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V \\ V & \varepsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1j} \\ C_{2j} \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} C_{1j} \\ C_{2j} \end{pmatrix}, \ (j = 1, 2). \tag{1}$$

と書ける．この固有値方程式の固有値 $E_1, E_2, (E_1 < E_2)$ の厳密解は

$$E_1 \equiv \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4V^2}}{2}, \ E_2 \equiv \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4V^2}}{2} \tag{2}$$

となる．同様に，固有値 E_1 に属する固有ベクトルの成分の厳密解は

$$C_{11} = \frac{V}{\sqrt{(E_1 - \varepsilon_1)^2 + V^2}}, \ C_{21} = \frac{E_1 - \varepsilon_1}{\sqrt{(E_1 - \varepsilon_1)^2 + V^2}}, \tag{3}$$

と与えられる。相互作用 V を無摂動系に対する摂動と見なして次の問いに答えよ。

1. 上記の厳密解の結果を用いて、相互作用 V について 2 次まで展開した近似で、固有値 E_1 と E_2 をそれぞれ求めよ。（ヒント：実数 a, n に対して $(1+a)^n \approx 1 + an$ for $|a| << 1$）

2. 固有値 $E_1, E_2, (E_1 < E_2)$ を相互作用 V について 2 次まで展開した近似式において、$E_1 + E_2 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ であるかどうか（厳密解の性質の 1 つを満たすかどうか）確かめよ。

3. 固有状態の成分 C_{11} を相互作用 V について 2 次まで展開した近似式と固有状態の成分 C_{21} を V について 1 次まで展開した近似式を求めよ。

(解答例)

1. 題意より、ヒントの近似式を微小量 $2V/(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ について適用すると

$$\begin{aligned} \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4V^2} &= (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\sqrt{1 + \left(\frac{2V}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right)^2} \\ &\approx (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2V}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right)^2\right] \\ \to E_1 &\approx \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_2 + \varepsilon_1) - (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2V}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right)^2\right]\right] \\ &\approx \varepsilon_1 - \frac{V^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \end{aligned} \tag{4}$$

同様にして

$$E_2 \approx \varepsilon_2 + \frac{V^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \tag{5}$$

(これらの結果は摂動理論の公式に一致している.)

2. 　前問の結果より、

$$E_1 + E_2 \approx \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \tag{6}$$

であることが分かる．これは厳密解の性質（相互作用が働いても、2 つの準位のエネルギーの重心は変化しないこと）と同じである.

3. 同様にして

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{\sqrt{1+(\frac{V}{\varepsilon_2-\varepsilon_1})^2}} \\ &\approx 1-\frac{V^2}{2(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}. \end{aligned} \tag{7}$$

このように，展開係数 C_{11} には摂動 V の 1 次項は現れず，2 次の項が現れる．さらに

$$\begin{aligned} E_1-\varepsilon_1 &= \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_2-\varepsilon_1)-(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\sqrt{1+\left(\frac{2V}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)^2}\right] \\ &\approx \frac{1}{2}(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\left[1-\left(1+\frac{1}{2}\left(\frac{2V}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)^2\right)\right] \\ &\approx -\frac{V^2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}, \\ \to C_{21} &= \frac{E_1-\varepsilon_1}{\sqrt{(E_1-\varepsilon_1)^2+V^2}} \approx \frac{-\frac{V^2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}}{\sqrt{(\frac{V^2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1})^2+V^2}} \\ &\approx -\frac{V}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}. \end{aligned} \tag{8}$$

展開係数 C_{11} と対照的に、C_{21} には摂動 V の 1 次項が現れる.（これらの展開係数についての近似的な数式も摂動論の公式と一致している！）