５章　レポート課題の解答

（A）資料の本文中での $\Psi_n^{(k)}$ において、n と k は何を示しているのか。

n 番目の解の k 次摂動の波動関数であることを示している。

（B）式(20)を導出せよ。式(19)式までに示された式は全て使ってよい。

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\Psi_n^{(2)} + \hat{w}\Psi_n^{(1)} - E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} - E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)} = 0 \tag{11}$$

$$\Psi_n^{(0)} = \Phi_n \qquad (n = 0,1,2,3,\cdots) \tag{12}$$

$$E_n^{(1)} = \int \Phi_n^* \hat{w} \Phi_n dx \ = w_{nn} \qquad (n = 0,1,2,3,\cdots) \tag{15}$$

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{\substack{k=0 \\ (k\neq n)}}^{\infty} \frac{w_{kn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)} \Phi_k \tag{17}$$

以上を使う。(17)式と同じ考え方で $\Psi_n^{(2)}$ にも Φ_n は含まれないとしてよい。(12) (15) (17)式を(11)式に代入して、

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\Psi_n^{(2)} + \left(\hat{w} - w_{nn}\right) \sum_{\substack{k=0 \\ (k\neq n)}}^{\infty} \frac{w_{kn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)} \Phi_k - E_n^{(2)}\Phi_n = 0$$

左側から Φ_n を乗じて全空間で積分する。

$$\int \Phi_n (\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\Psi_n^{(2)} dv + \int \Phi_n \left(\hat{w} - w_{nn}\right) \sum_{\substack{k=0 \\ (k\neq n)}}^{\infty} \frac{w_{kn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)} \Phi_k dv - \int \Phi_n E_n^{(2)} \Phi_n dv = 0$$

第１項と第２項の後半は直交性を使ってゼロになる。

$$\sum_{\substack{k=0 \\ (k\neq n)}}^{\infty} \frac{w_{kn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)} \int \Phi_n \hat{w} \Phi_k dv - E_n^{(2)} \int \Phi_n \Phi_n dv = 0$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{\substack{k=0 \\ (k\neq n)}}^{\infty} \frac{w_{kn} w_{nk}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)}$$

（C）$n = 0$ 、$w_{nk} = w_{kn}$ とすると式(20)は常に負値（マイナスの値）であることを示せ。

(20)式で $n = 0$ とすると

$$E_0^{(2)} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{w_{k0} w_{0k}}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_k)} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left|w_{k0}\right|^2}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_k)}$$

ここで $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \cdots$ と考えているので、$\varepsilon_0 - \varepsilon_k < 0$ 、従って、

$$E_0^{(2)} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{w_{k0} w_{0k}}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_k)} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left|w_{k0}\right|^2}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_k)} < 0$$