摂動計算（perturbation）

久島広幸 (h2@hisasima.jp)

初稿 2015 年 2 月 14 日
revised 2022 年 8 月 8 日

概要

摂動計算のその奥義を筆者なりにまとめてみると，

- 前提として，理想的な条件などを課すことによって安定な解や厳密な解が求まっている，または求まっているものとし，
- 解きたい問題は，その理想的な条件だけでは成立しないだろうと踏んで，何がしかの付帯条件がついた「現実的」な条件であるものと覚悟し，
- とはいえそんなに理想的な条件からはずれていないだろうから，その現実的な条件のもとでの解も厳密な解からはそれほどにはずれていないだろうとし，
- 微小量の冪乗をもちいて近似する，微小量の効果を反映する

ということになろうか．この奥義のもと，摂動計算を象徴的に書けば，

> わかっている問題 P と解きたい問題 Q があって，Q は P をずらしたものだとみなす．そのずらしのことを「摂動項 r」と呼んで，$Q \sim P + r$ と近似して Q を解こうとするもの

といえるのではないかと思う．

ただし，対象によってそのレシピはいろいろであるようだ．本稿は，上記の奥義のもとで，実例として

- 二次方程式
- 固有値方程式

の具体例をみていったものである．

1　二次方程式の場合

1.1　プロローグ

方程式 $x^2 - 8x + 15 = 0$ を考えてみる．これは，因数分解をして，

$$x^2 - 8x + 15 = 0 \quad\Longleftrightarrow\quad (x-3)(x-5) = 0 \quad\therefore\ x = 3,\ 5$$

ともとまることはおなじみの通りである．さて次に，定数部が微妙に違っているつぎの２つの方程式を考える：

$$x^2 - 8x + 14.98 = 0 \tag{1.1}$$
$$x^2 - 8x + 15.02 = 0. \tag{1.2}$$

２次方程式なので解をもとめるアルゴリズムがある．それを用いて少数第９位[*1] まで求めてならべてみると[†]

$$\begin{aligned}
&x^2 - 8x + 14.98 = 0 &&\therefore\ x = 2.990049506, \quad 5.009950495\ , \\
&x^2 - 8x + 15 = 0 &&\therefore\ x = 3.000000000, \quad 5.000000000\ , \\
&x^2 - 8x + 15.02 = 0 &&\therefore\ x = 3.010050507, \quad 4.989949494\ ,
\end{aligned}$$

となり，微妙にずれ動いていることがみてとれる．

[*1] 手持ちの電卓 CASIO FX-702P で出た桁数だ．

[†] LaTeX 2_ε ノート: この段組みの表示には alignat 環境を使った．align 環境で \hspace{10mm} で間隔幅の指定が可能であると言われているのだがうまく行かなかった．\mspace でも同様に駄目であった．

2次方程式には解を求めるアルゴリズムがあるので，上記の計算が電卓を用いて，できた．けれども，もしそのようなアリゴリズムがないような場合，どうやって解を導けばよいか．本稿の主題である「摂動計算」はそのやりかたのひとつを与えてくれるものだ．

しかしながら，そしてある程度予想できることであるが，厳密な解が求まるという保証はない．厳密でなくてもよいという広い気持ちと覚悟をまず持つ．近似的な解で十分であるとするのである．ついで，できるところからはじめる，という姿勢をとる．ということで，2次方程式の解法のアルゴリズムはひとまず忘れる．

まず，$x^2 - 8x + 15 = 0$ の解は，$x = 3, 5$ であることが何らかの方法でわかっているとする[2]．つぎに，式 (1.1), (1.2) を

$$x^2 - 8x + 15 + \epsilon = 0 \tag{1.3}$$

と変形する．もとの式からのずれの部分を ϵ で表現するようにしたものである．これを「摂動項」と呼ぶ．式 (1.1), (1.2) はそれぞれ $\epsilon = -0.02, \epsilon = 0.02$ に対応している．これをもとに摂動的に解を求めていってみよう．

1.2 単純な冪乗展開の方法

ひとつの重要なアイデアを導入する．x を，ずれを表す ϵ の冪乗の関数であると考える．すなわち，

$$x = x(\epsilon) = a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + \cdots$$

と考えることにするのである．このアイデアを式 (1.3) にもちいれば，

$$x^2 - 8x + 15 + \epsilon = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + \cdots)^2 - 8\cdot(a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + \cdots) + 15 + \epsilon = 0\,.$$

計算を進める．Landau の記号をもちいて，ϵ^3 までのオーダーを記すと，

$$\begin{gathered}\left(a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + O(\epsilon^3)\right)^2 - 8\cdot\left(a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + O(\epsilon^3)\right) + 15 + \epsilon = 0 \\ \Longleftrightarrow \\ (a_0^2 - 8a_0 + 15) + (2a_0a_1 - 8a_1 + 1)\epsilon + (2a_0a_2 + a_1^2 - 8a_2)\epsilon^2 + O(\epsilon^3) = 0\end{gathered}$$

となる[3]．ϵ の任意性を利用すれば（ϵ に対する恒等式），これから

$$a_0^2 - 8a_0 + 15 = 0 \tag{1.4}$$
$$2a_0a_1 - 8a_1 + 1 = 0 \tag{1.5}$$
$$2a_0a_2 + a_1^2 - 8a_2 = 0 \tag{1.6}$$

が得られる．式 (1.4) は a_0 の 2 次方程式であるが，そもそもこれは，$\epsilon = 0$ の場合でもある．つまり解はすでに求まっていて，$a_0 = 3, 5$ である．a_0 が決まれば，式 (1.5)，(1.6)) から a_1, a_2 は数珠繋ぎ的にもとまる．

$$a_0 = 3 \text{ の場合：} \quad a_1 = \frac{1}{2}, \quad a_2 = \frac{1}{8} \qquad \Longrightarrow \quad x(\epsilon) = 3 + \frac{1}{2}\epsilon + \frac{1}{8}\epsilon^2 + O(\epsilon^3) \tag{1.7}$$
$$a_0 = 5 \text{ の場合：} \quad a_1 = \frac{-1}{2}, \quad a_2 = \frac{-1}{8} \quad \Longrightarrow \quad x(\epsilon) = 5 - \frac{1}{2}\epsilon - \frac{1}{8}\epsilon^2 + O(\epsilon^3) \tag{1.8}$$

ϵ^4 まで計算すれば，a_3 も求まる．この計算を継続すれば，a_{10}, a_{20} などを求めることも原理的には可能である（実際に計算するのは非常に面倒だ）．

もとの方程式にもどると，各々の場合の ϵ との関係は，

$$\begin{aligned}\epsilon = -0.02 \text{ の時} \quad & x(\epsilon)^2 - 8x(\epsilon) + 14.98 = 0 \\ \epsilon = 0.02 \text{ の時} \quad & x(\epsilon)^2 - 8x(\epsilon) + 15.02 = 0\end{aligned}$$

[2] たとえば自然数を順次当てはめて行ってみる，とか，完全平方形を作成する，などとして探し出す．とにかくここでは2次方程式の解の公式は知らないので，それから求めてはいけない．

[3] $xO(x^n) = O(x^{n+1}), \quad O(x^m)O(x^n) = O(x^{m+n}), \quad AO(x^n) + BO(x^n) = O(x^n)$ などの Landau 記号の性質を用いた．

であった．これに結果を代入し，$O(\epsilon^3)$ を無視すれば，

$$\begin{aligned}
a_0 = 3: &\quad x(-0.02) = 3 + \frac{1}{2} \times (-0.02) + \frac{1}{8} \times (-0.02)^2 = 2.990050000 \\
a_0 = 3: &\quad x(0.02) = 3 + \frac{1}{2} \times (0.02) + \frac{1}{8} \times (0.02)^2 = 3.010050000 \\
a_0 = 5: &\quad x(-0.02) = 5 - \frac{1}{2} \times (-0.02) - \frac{1}{8} \times (-0.02)^2 = 5.009950000 \\
a_0 = 5: &\quad x(0.02) = 5 - \frac{1}{2} \times (0.02) - \frac{1}{8} \times (0.02)^2 = 4.989950000
\end{aligned}$$

である．比較のために，先に求めた解を再度記そう．

$$\begin{aligned}
x^2 - 8x + 14.98 = 0 &\quad \therefore\ x = 2.990049506, \quad 5.009950495\ , \\
x^2 - 8x + 15.02 = 0 &\quad \therefore\ x = 3.010050507, \quad 4.989949494\ .
\end{aligned}$$

それなりによい値を生成している．

1.3 マクローリン展開の利用

1.2 節での根幹は，ϵ に対する恒等式であるという事実を用いての導出であった．二次方程式に対するもうひとつの方法として，その微分を利用するという方法がある．解析学の重要な結果であるマクローリン展開を利用するのである．

ここでも，x を ϵ の関数 $x(\epsilon)$ であると考えることは変わらない．$x(\epsilon)$ をマクローリン展開すれば

$$x(\epsilon) = x(0) + \frac{x'(0)}{1!}\epsilon + \frac{x''(0)}{2!}\epsilon^2 + \frac{x^{(3)}(0)}{3!}\epsilon^3 + \cdots \tag{1.9}$$

となるから[4]，ϵ の冪乗の係数である微分係数 $x'(0)$, $x''(0)$, $x^{(3)}(0)$ などなどが必要なところまで求まれば，$x(\epsilon)$ が記述できることになる．

式 (1.3) の方程式

$$(x(\epsilon))^2 - 8x(\epsilon) + 15 + \epsilon = 0$$

の両辺を ϵ で微分すると，

$$\begin{aligned}
2x(\epsilon)x'(\epsilon) - 8x'(\epsilon) + 1 = 0 \qquad (1.10) \\
\therefore\ x'(\epsilon) = \frac{-1}{2x(\epsilon) - 8}
\end{aligned}$$

となる．これより，$\epsilon = 0$ の場合の微分係数は，

$$x'(0) = \frac{-1}{2x(0) - 8}\ .$$

さて，われわれは，$\epsilon = 0$ の時の解は 3, 5 であると知っていたのであった．それゆえ，$x(0) = 3$ の方をもちいると，

$$x'(0) = \frac{1}{2}\ .$$

もう一段階すすむ．式 (1.10) を再度 ϵ で微分する：

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{d\epsilon}\left\{2x(\epsilon)x'(\epsilon) - 8x'(\epsilon) + 1\right\} = 2\left(x'(\epsilon)\right)^2 + 2x(\epsilon)x''(\epsilon) - 8x''(\epsilon) = 0 \\
&\therefore\ x''(\epsilon) = \frac{-2\left(x'(\epsilon)\right)^2}{2x(\epsilon) - 8}\ .
\end{aligned}$$

[4] 導関数 $dx(\epsilon)/d\epsilon$ を $x'(\epsilon)$ と表記した（より高階の導関数も同様に記す）．ϵ に値をいれる「微分係数」としてみる際には $x'(\epsilon)$ の方が見易いのでそれを利用する．$dx(\epsilon)/d\epsilon$ の表記は導関数には向いているが，微分係数では煩雑になりすぎる．

$x(0)=3,\ x'(0)=1/2$ を用いれば，$x''(0)=1/4$ と求まる．さらに微分すると$\cdots\cdot$と繰り返していけば，$\epsilon=0$ での各階数の微分係数が順次求まることが見えてくる．

$x(0)=5$ の方を利用すれば，微分係数はおのおの

$$x'(0)=\frac{-1}{2},\quad x''(0)=\frac{-1}{4}$$

と求まる．

この結果を $x(\epsilon)$ のマクローリン展開 (1.9) にあてはめれば，$x(0)=3,5$ の各々の系列で

$$\begin{aligned} x(0)=3: &\quad x(\epsilon)=3+\frac{1}{2}\epsilon+\frac{1}{8}\epsilon^2+O(\epsilon^3)\\ x(0)=5: &\quad x(\epsilon)=5-\frac{1}{2}\epsilon-\frac{1}{8}\epsilon^2+O(\epsilon^3)\end{aligned}$$

と求まり，式 (1.7)，(1.8) と同様の結果を得る．

1.4 もう一つの例

次に，定数項への摂動ではなく，x の 1 次の項の摂動の例をみる．

$$x^2-2\epsilon x-4=0$$

を考えてみよう．今までと同様に $x=x(\epsilon)$ としてあらわせば，

$$x(\epsilon)^2-2\epsilon x(\epsilon)-4=0\ .$$

$\epsilon=0$ の場合は簡単に解けて，

$$x(0)^2-4=0\quad\therefore\ x(0)=\pm2\ .$$

ϵ の冪乗展開で恒等式をもちいるやりかたでも構わないが，ここではマクローリン展開の方法でいっきにやってみる．

ϵ で微分すると，

$$2x(\epsilon)x'(\epsilon)-2x(\epsilon)-2\epsilon x'(\epsilon)=0\quad\therefore\ x'(\epsilon)=\frac{x(\epsilon)}{x(\epsilon)-\epsilon}$$

となるから，

$$x'(0)=\frac{x(0)}{x(0)-0}=1\ .$$

さらに微分を続ければ，

$$(2x(\epsilon)-2\epsilon)x''(\epsilon)+2\left(x'(\epsilon)\right)^2-4x'(\epsilon)=0\quad\therefore\ x''(\epsilon)=\frac{2x'(\epsilon)-\left(x'(\epsilon)\right)^2}{x(\epsilon)-\epsilon}$$

$$\text{i.e.}\quad x''(0)=\frac{2x'(0)-\left(x'(0)\right)^2}{x(0)-0}=\begin{cases}\dfrac{1}{2} & (\text{where } x(0)=2)\\ -\dfrac{1}{2} & (\text{where } x(0)=-2)\end{cases}$$

と求まる．ここで $x(\epsilon)$ のマクローリン展開を利用すれば，

$$x(\epsilon)=x(0)+\frac{x'(0)}{1!}\epsilon+\frac{x''(0)}{2!}\epsilon^2+O(\epsilon^3)=\pm2+\epsilon\pm\frac{1}{4}\epsilon^2+O(\epsilon^3)=\epsilon\pm\left(2+\frac{1}{4}\epsilon^2\right)+O(\epsilon^3)\ . \tag{1.11}$$

$O(\epsilon^3)$ を無視して，$\epsilon=0.2,\ 0.02,\ 0.002$ で比較してみると

$$\begin{aligned} x(0.2)&=0.2\pm\left(2+\frac{1}{4}(0.2)^2\right)=2.210000000,\quad -1.810000000\\ x(0.02)&=0.02\pm\left(2+\frac{1}{4}(0.02)^2\right)=2.020100000,\quad -1.980100000\\ x(0.002)&=0.002\pm\left(2+\frac{1}{4}(0.002)^2\right)=2.002001000,\quad -1.998001000\ .\end{aligned}$$

不意に 2 次方程式の解のアルゴリズムを思い出して元の式の解（区別のために x_t とおく）を計算すると

$$\begin{aligned}
x_t(\epsilon) &= \epsilon \pm \sqrt{\epsilon^2+4} \\
x_t(0.2) &= 2.209975124, \quad -1.809975124 \\
x_t(0.02) &= 2.020099997, \quad -1.980099997 \\
x_t(0.002) &= 2.002000999, \quad -1.998000999\ .
\end{aligned}$$

それなりの近似解が求まっている．

1.5 簡単にはいかない例

1.5.1 摂動項の工夫

$(x-1)^2 = 0$ に正の摂動項 ϵ が加わった

$$(x-1)^2 = \epsilon \iff x^2 - 2x + 1 - \epsilon = 0$$

を考えてみる．今までと同様に $x = x(\epsilon)$ としてあらわせば，

$$(x(\epsilon))^2 - 2x(\epsilon) + 1 - \epsilon = 0\ . \tag{1.12}$$

$\epsilon = 0$ の場合は $x(0) = 1$ であることはこの式の形から明らかだ．ここで，マクローリン展開を用いるために，微分して微分係数をもとめてみる．すると，意外な事がらが見えてくる．式 (1.12) の両辺を ϵ で微分すると

$$\frac{d}{d\epsilon}\left\{x(\epsilon)^2 - 2x(\epsilon) + 1 - \epsilon\right\} = 2x(\epsilon)x'(\epsilon) - 2x'(\epsilon) - 1 = 2x'(\epsilon)(x(\epsilon)-1) - 1 = 0$$

であるから，$\epsilon = 0$ の時に注目すると，$x(0) = 1$ であるので

$$2x'(0)(x(0)-1) - 1 = 0 \quad \therefore\ -1 = 0$$

となる．何かがおかしい．

そもそもの出発点に立ち返ろう．式 (1.12) ではうまくいかなかった．ここで摂動項を η^2 とするという細工をし，かつ，x は η の関数であるとしてみると：

$$(x(\eta))^2 - 2x(\eta) + 1 - \eta^2 = 0\ . \tag{1.13}$$

η で両辺微分すれば

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x(\eta)^2 - 2x(\eta) + 1 - \eta^2\right\} = 2x(\eta)x'(\eta) - 2x'(\eta) - 2\eta = x'(\eta)(x(\eta)-1) - \eta = 0$$

であり，$\eta = 0$ としてもこの式からは $x'(0)$ は求まらない．しかしながら，ϵ を摂動項としたときのように $-1 = 0$ という矛盾した結果を導出してしまうことななくなっている．それゆえ，あきらめずにさらに微分を続ければ，

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x'(\eta)(x(\eta)-1) - \eta\right\} = x''(\eta)(x(\eta)-1) + (x'(\eta))^2 - 1 = 0 \tag{1.14}$$

であり，これから $\eta = 0$ として，

$$(x'(0))^2 = 1 \quad \therefore\ x'(0) = \pm 1$$

ともとまる．式 (1.14) にさらに微分を施し，$\eta = 0$ の時の微分係数をもとめると，

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{d\eta}\left\{x''(\eta)(x(\eta)-1) + (x'(\eta))^2 - 1\right\} = x^{(3)}(\eta)(x(\eta)-1) + 3x''(\eta)x'(\eta) = 0 \qquad (1.15)\\
&\therefore\ x''(0) = 0\ .
\end{aligned}$$

式 (1.15) にも同様のことをすれば

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x^{(3)}(\eta)(x(\eta)-1)+3x''(\eta)x'(\eta)\right\}=x^{(4)}(\eta)(x(\eta)-1)+4x^{(3)}(\eta)x'(\eta)+3\left(x''(\eta)\right)^2=0$$
$$\therefore\ x^{(3)}(0)=0\ .$$

以下同様にして進めていけば，$x^{(n)}(0)=0\ (n\geq 2)$ となる．

マクローリン展開にあてはめると

$$x(\eta)=x(0)+\frac{x'(0)}{1!}\eta+\frac{x''(0)}{2!}\eta^2+\frac{x^{(3)}(0)}{3!}\eta^3+\cdots=1\pm\eta$$

となって，結果はイグザクトに求まるものになる．

そもそもの $(x-1)^2=\eta^2$ に求めた x を代入すれば，$((1\pm\eta)-1)^2=\eta^2$ となるから，充分納得の行く形である．イグザクトに求まるところが面白い．

1.5.2 虚数の登場

今までの例は，実は，摂動項を考慮してもかならず実数解を持つ例を利用してきたのであった[5]．ここでは，実数解を持たない方程式となる場合を概観してみる．

1.5.1 節での問題を若干変えて $(x-1)^2=0$ に負の摂動項が加わった

$$(x-1)^2=-\epsilon\iff x^2-2x+1+\epsilon=0$$

という，2 乗が負になるものを考える．もちろん $\epsilon>0$ としている．1.5.1 節と同様に x を ϵ の関数とみなせば

$$(x(\epsilon))^2-2x(\epsilon)+1+\epsilon=0\ . \tag{1.16}$$

とあらわせて，この式 (1.16) の両辺を ϵ で微分すると

$$\frac{d}{d\epsilon}\left\{x(\epsilon)^2-2x(\epsilon)+1+\epsilon\right\}=2x(\epsilon)x'(\epsilon)-2x'(\epsilon)+1=2x'(\epsilon)(x(\epsilon)-1)+1=0$$

となり，$x(0)=1$ と組み合わせると $1=0$ とやはり何かがおかしい結果になる．

ここで，やはり前と同様に，摂動項を η^2 にし，x は η の関数であるとすれば

$$(x(\eta))^2-2x(\eta)+1+\eta^2=0 \tag{1.17}$$

であり，η で両辺微分すれば

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x(\eta)^2-2x(\eta)+1+\eta^2\right\}=2x(\eta)x'(\eta)-2x'(\eta)+2\eta=x'(\eta)(x(\eta)-1)+\eta=0$$

となり，$\eta=0$ としても $x'(0)$ は求まらないが，$1=0$ という矛盾した結果はでてこない．

さらに微分を続ければ，

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x'(\eta)(x(\eta)-1)+\eta\right\}=x''(\eta)(x(\eta)-1)+\left(x'(\eta)\right)^2+1=0$$

であり，これから $\eta=0$ として，

$$(x'(0))^2=-1\quad\therefore\ x'(0)=\pm i\quad(i\text{ は虚数単位})$$

と求まる．さらに微分を続け，$\eta=0$ の時の微分係数をもとめると，

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x''(\eta)(x(\eta)-1)+\left(x'(\eta)\right)^2+1\right\}=x^{(3)}(\eta)(x(\eta)-1)+3x''(\eta)x'(\eta)=0$$
$$\therefore\ x''(0)=0\ ,$$

$$\frac{d}{d\eta}\left\{x^{(3)}(\eta)(x(\eta)-1)+3x''(\eta)x'(\eta)\right\}=x^{(4)}(\eta)(x(\eta)-1)+4x^{(3)}(\eta)x'(\eta)+3\left(x''(\eta)\right)^2=0$$
$$\therefore\quad x^{(3)}(0)=0\ .$$

[5] すべて 2 次方程式の例であるから，心配ならば判別式 D を計算してみると良い．$D\geq 0$ となっているはずである．

以下同様にして進めていけば，$x^{(n)}(0) = 0$ $(n \geq 2)$ となる．$x(\eta)$ のマクローリン展開を利用すれば，

$$x(\eta) = x(0) + \frac{x'(0)}{1!}\eta + \frac{x''(0)}{2!}\eta^2 + \frac{x^{(3)}(0)}{3!}\eta^3 + \cdots = 1 \pm i\eta$$

とイグザクトに求まる．

1.5.3　からくり

さて，どうしてうまくいったのだろうか？ここで式 (1.12) と細工をした式 (1.13) を並べてみる．

$$x(\epsilon)^2 - 2x(\epsilon) + 1 - \epsilon = 0$$
$$x(\eta)^2 - 2x(\eta) + 1 - \eta^2 = 0$$

ここから，$\eta^2 = \epsilon$ すなわち，$\eta = \sqrt{\epsilon}$ として考え直したと解釈できる．つまり，x の展開において，ϵ の冪ではなく，$\sqrt{\epsilon}$ の冪で展開したものなのである．実際，

$$x = x(\sqrt{\epsilon}) = a_0 + a_1\sqrt{\epsilon} + a_2\epsilon + O(\epsilon^{3/2})$$

として，$x^2 - 2x + 1 - \epsilon = 0$ に代入して恒等式の方法を用いてみると[6]，

$$a_0^2 - 2a_0 + 1 = 0 \quad \text{（定数の項）}$$
$$2a_1(a_0 - 1) = 0 \quad \text{（}\sqrt{\epsilon}\text{ の項）}$$
$$a_1^2 + 2a_2(a_0 - 1) - 1 = 0 \quad \text{（}\epsilon\text{ の項）}$$

が獲得できる．したがって，$a_0 = 1$，$a_1 = \pm 1$ と求まり，より高次のオーダにたいしても計算を進めれば，$a_n = 0$ $(n \geq 2)$ が求まる．結果，マクローリン展開の場合と同じになる．

式 (1.16) と細工をした式 (1.17) でも，ϵ の項が

$$a_1^2 + 2a_2(a_0 - 1) + 1 = 0$$

となるだけで，他は同じである．

摂動計算を実行してみるとき，オーソドックスなやり方（ϵ の冪の利用）で不定 (不能？) な形になっても簡単に諦めてはいけない．冪に用いるものを試行錯誤して変更してみるとうまくいくこともある，という処方のひとつの例である．

1.6　手順の整理

ここまでの手順を整理すると，

1. $Q(x)$（たとえば $x^2 - 8x + 14.98 = 0$ とか $x^2 - 2\epsilon x - 4 = 0$ など）を解きたい．
2. $P(x)$（たとえば $x^2 - 8x + 15 = 0$ とか $x^2 - 4 = 0$）の解は知っている．
3. $Q(x)$ は，$P(x)$ をずらしたものであるとみなす（このことを，「摂動を加える」と言ったりもする)．
4. x を ϵ の関数 $x(\epsilon)$ とみなす．
   (a) ϵ の冪乗の和と仮定して，ϵ の恒等式から定数を必要なところまで順次求める．
   (b) ϵ で微分しながら $\epsilon = 0$ の時の微分係数を必要なところまで順次求める．結果をマクローリン展開に代入し，ϵ の冪乗での表現を導く．
5. 必要な冪乗のオーダーまで計算をし，近似解を得る．

ということになるだろう．摂動計算のひとつの例である．

[6] 当然のことながら，$x = x(\epsilon) = a_0 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + O(\epsilon^3)$ ではうまくいかない．

1.7 汎用化

いま，$f(x)=0$ は解けている，つまり，その解が $x=p$ とわかっているものとしよう．解きたい問題は，$f(x)$ に摂動項を加えたもの，つまり $f(x,\epsilon)=0$ であるとする．ただし，$f(x,0)=0$ でなければならない（ϵ がゼロならば摂動はない，ということを意味している）．ここで，$x=x(\epsilon)$ であるとして，解きたい問題を丁寧に書けば

$$f(x(\epsilon),\epsilon)=0$$

となる．これを ϵ で微分しよう．

$$\frac{d}{d\epsilon}f(x(\epsilon),\epsilon)=0 \quad\Longleftrightarrow\quad \frac{\partial f(x(\epsilon),\epsilon)}{\partial x(\epsilon)}\frac{dx(\epsilon)}{d\epsilon}+\frac{\partial f(x(\epsilon),\epsilon)}{\partial\epsilon}=0 \tag{1.18}$$

このままでは，表記が煩わしくなって見通しがわるくなりそうだ．そこで，関数 h を u で偏微分したものを h_u と表記することにする．この取り決めから，関数 h_u を v で偏微分したものは h_{uv} となる．すると，(1.18) は，

$$f_x(x(\epsilon),\epsilon)\,x'(\epsilon)+f_\epsilon(x(\epsilon),\epsilon)=0 \qquad \text{（引数を横着して } f_x\,x'+f_\epsilon=0 \text{ と書くこともある）} \tag{1.19}$$

となる．この先のマクローリン展開を視野に入れて $\epsilon=0$ の場合を考える．さらに $f(x)=0$ は解けているという前提から $x(0)=p$ が解であるとしたので，

$$x'(0)=-\frac{f_\epsilon(x(0),0)}{f_x(x(0),0))}=-\frac{f_\epsilon(p,0)}{f_x(p,0)}$$

となる．もちろん分母となる $f_x(p,0)$ がゼロであってはこれは成り立たない．そういう場合はこの摂動計算がそもそも実行できないということなのである．

もう一段進める．(1.19) を ϵ で微分すると，

$$\frac{d}{d\epsilon}\left(f_x\,x'+f_\epsilon\right)=0 \quad\Longleftrightarrow\quad \frac{d}{d\epsilon}(f_x\,x')+\frac{d}{d\epsilon}f_\epsilon=0 \quad\Longleftrightarrow\quad \frac{df_x}{d\epsilon}x'+f_x\frac{dx'}{d\epsilon}+\frac{df_\epsilon}{d\epsilon}=0 \tag{1.20}$$

ややこしい計算を実行しよう．

$$\frac{df_x}{d\epsilon}=\frac{\partial f_x}{\partial x}\frac{dx}{d\epsilon}+\frac{\partial f_x}{\partial\epsilon}=f_{xx}\,x'+f_{x\epsilon}, \qquad \frac{df_\epsilon}{d\epsilon}=\frac{\partial f_\epsilon}{\partial x}\frac{dx}{d\epsilon}+\frac{\partial f_\epsilon}{\partial\epsilon}=f_{\epsilon x}\,x'+f_{\epsilon\epsilon}$$

であるから，式 (1.20) に代入すれば，

$$\begin{aligned}(1.20) \quad &\Longleftrightarrow\quad f_{xx}\,(x')^2+f_{x\epsilon}\,x'+f_x\,x''+f_{\epsilon x}\,x'+f_{\epsilon\epsilon}=0\\ &\Longleftrightarrow\quad f_x\,x''+f_{xx}\,(x')^2+2f_{x\epsilon}\,x'+f_{\epsilon\epsilon}=0 \qquad \text{（}f_{x\epsilon}=f_{\epsilon x}\text{ を利用）}\end{aligned}$$

であり，先と同様に $\epsilon=0$ の場合を考えると，

$$x''(0)=-\frac{f_{xx}(p,0)\,\left(x'(0)\right)^2+2f_{x\epsilon}(p,0)x'(0)+f_{\epsilon\epsilon}(p,0)}{f_x(p,0)}$$

となる．計算は複雑になるけれでも，高位のオーダーの分も順次同様にやって行けば良い．その結果，これらの微分係数を $x(\epsilon)$ のマクローリン展開

$$x(\epsilon)=x(0)+\frac{x'(0)}{1!}\epsilon+\frac{x''(0)}{2!}\epsilon^2+O(\epsilon^3)$$

に代入して，求める問題の解が，ϵ の冪乗で求まるのである．

第 1.4 節の例で確認をしてみよう．f と求まっている解を記せば，

$$\begin{aligned}&f(x(\epsilon),\epsilon)=x(\epsilon)^2-2\epsilon x(\epsilon)-4=0,\\ &x(0)=\pm 2\end{aligned}$$

である．まず偏微分を実行しておくと，

$$
\begin{aligned}
f_x &= \frac{\partial f}{\partial x} = 2x - 2\epsilon, & f_{xx} &= \frac{\partial f_x}{\partial x} = 2, \\
f_\epsilon &= \frac{\partial f}{\partial \epsilon} = -2x, & f_{\epsilon\epsilon} &= \frac{\partial f_\epsilon}{\partial \epsilon} = 0, \\
f_{x\epsilon} &= \frac{\partial f_x}{\partial \epsilon} = -2, & f_{\epsilon x} &= \frac{\partial f_\epsilon}{\partial x} = -2
\end{aligned}
$$

となる（最後のものは，$f_{x\epsilon} = f_{\epsilon x}$ の確認）．したがって，

$$
\begin{aligned}
x'(0) &= -\frac{f_\epsilon(p,0)}{f_x(p,0)} = -\frac{-4}{4} = 1 \quad (\text{where } p = 2) \\
x'(0) &= -\frac{f_\epsilon(p,0)}{f_x(p,0)} = -\frac{4}{-4} = 1 \quad (\text{where } p = -2)
\end{aligned}
$$

であり，

$$
\begin{aligned}
x''(0) &= -\frac{f_{xx}(p,0)\ (x'(0))^2 + 2f_{x\epsilon}(p,0)x'(0) + f_{\epsilon\epsilon}(p,0)}{f_x(p,0)} = -\frac{2\cdot 1^2 + 2\cdot(-2)\cdot 1 + 0}{2\cdot 2} = \frac{1}{2} \quad (\text{where } p = 2) \\
x''(0) &= -\frac{f_{xx}(p,0)\ (x'(0))^2 + 2f_{x\epsilon}(p,0)x'(0) + f_{\epsilon\epsilon}(p,0)}{f_x(p,0)} = -\frac{2\cdot 1^2 + 2\cdot(-2)\cdot 1 + 0}{2\cdot(-2)} = \frac{1}{2} \quad (\text{where } p = -2)
\end{aligned}
$$

である．よってマクローリン展開は，

$$
x(\epsilon) = x(0) + \frac{x'(0)}{1!}\epsilon + \frac{x''(0)}{2!}\epsilon^2 + O(\epsilon^3) = \pm 2 + \epsilon \pm \frac{1}{4}\epsilon^2 + O(\epsilon^3)
$$

と，第 1.4 節の式 (1.11) と同じ結果を得る．

　ここまで，二次方程式を題材にして摂動項を加えた計算の実践を行ってきた．この方法を使えば，二次方程式に限らず，n 次方程式の場合でも摂動項を考慮することによって，近似的な解が求まるはずである．計算過程はかなり複雑で面倒なことになりそうではあるけれども，原理的なところは何も変わらないのである．

2　固有値方程式の場合

固有値方程式の摂動計算の特徴は，固有値が微妙にずれるとともに，それに合わせて固有ベクトルも微妙にずれる，という考え方をするところにある．どちらか一方だけがずれる，というようには考えない．

この計算の特徴を実感するために，ここでは，エルミート演算子による固有値方程式の摂動について考える[7]．ただし，あるひとつの固有値に対応する固有ベクトルは 1 つである（縮退[8]はしていない）とし，かつ，固有値が離散的な場合のみを取り扱う（いわゆる，「簡単のため」である）．

2.1　計算過程の詳細

まず, すでに解けている固有値方程式があるとしよう．その解決済みの固有値方程式のエルミート演算子を $\hat{H}_0$, 固有値を $\lambda_0^{(0)}, \lambda_1^{(0)}, \cdots, \lambda_m^{(0)}, \lambda_n^{(0)}, \cdots$, 各々の固有値に対応する固有ベクトルを $|0^{(0)}\rangle, |1^{(0)}\rangle, \cdots, |m^{(0)}\rangle, |n^{(0)}\rangle, \cdots$ と表記し（m, n は 0 を含めた自然数とする），固有ベクトルは規格化されているとすれば

$$\hat{H}_0 |m^{(0)}\rangle = \lambda_m^{(0)} |m^{(0)}\rangle , \quad \hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle , \quad \ldots ,$$

$$\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = \delta(m, n) , \tag{2.1}$$

$$\hat{1} = \sum_n |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| , \tag{2.2}$$

という関係が成立していることになる[9]．これが大前提.

解きたい問題は,

> $\hat{H} := \hat{H}_0 + \epsilon\hat{V}$ としたとき，つまり演算子が微妙にずれたと想定したときの固有値方程式
>
> $$\hat{H} |n\rangle = \lambda_n |n\rangle \tag{2.3}$$
>
> の解をどうやってもとめるか？

と言うものである．

この演算子の微妙なずれを示すパラメタ ϵ は何を意味しているものだろうか．まずあきらかなこととして，$\epsilon \to 0$ の極限では，$\hat{H}$ の固有値と固有ベクトルは $\hat{H}_0$ のそれらと同一にならなければならないということである．次いで考えられることは，ϵ が充分に小さいのならば，$\hat{H}$ の固有値それぞれは $\hat{H}_0$ の固有値のどれかに充分に近い，ということである．固有ベクトルについても同様な考えを適用できる．したがって，この近い物どうしを同じ指標を使ってあらわせば,

$$\begin{aligned} &\lambda_m \sim \lambda_m^{(0)} ; \quad |m\rangle \sim |m^{(0)}\rangle , \\ &\lambda_n \sim \lambda_n^{(0)} ; \quad |n\rangle \sim |n^{(0)}\rangle , \\ &\cdots\cdots . \end{aligned}$$

この事柄は，$\epsilon\hat{V}$（一般に摂動項と呼ばれる）を考えたことによって生じる固有値・固有ベクトルの「ずれ」は，$\epsilon\hat{V}$ がない時の固有値・固有ベクトルの間隔よりも小さい，ということを述べていて，生じた変化（ずれ）は，微小なものであるということをも意味しているものである．

以上の考察のもとで，摂動計算の奥義の ϵ の冪での展開を利用する．つまり，ϵ の冪ごとに「ずれ］をあらわす固有値，固有ベクトル記述するというアイデアをもちいて，その「ずれ」の程度をあらわすことにするのである．記述においては，ϵ^k に依存する部分には $^{(k)}$ という指標を右肩に乗せることにする．具体的には

- 固有値 λ_n は $\lambda_n^{(0)}$ から微妙にずれていると予想し，次の様に展開できると考える：

$$\lambda_n \approx \lambda_n^{(0)} + \epsilon\lambda_n^{(1)} + \epsilon^2\lambda_n^{(2)} + \cdots .$$

---

[7] と大きく出てみても，内容は朝永著「角運動量とスピン」の摂動論 [1, p.103] の写経である．

[8] 「ある固有値に対する固有ベクトルが複数ある」ということが「縮退している」ということの定義である．裏を返す物言いでは，「異なる固有ベクトルで同じ値の固有値を持つものがある」ということになる．このような状況を，「固有値が縮退している」と言うこともある．

[9] エルミート演算子には正規直交完全基底ベクトルが存在することを思い出そう．また，$\hat{1}$ は射影演算子と呼ばれるものである．

- 固有ベクトル $|n\rangle$ は $|n^{(0)}\rangle$ から微妙にずれていると予想し，次の様に展開できると考える：

$$|n\rangle \approx |n^{(0)}\rangle + \epsilon\,|n^{(1)}\rangle + \epsilon^2\,|n^{(2)}\rangle + \cdots .$$

ということになる．

式 (2.3) に代入してみよう．左辺，右辺それぞれ

$$\begin{aligned}\hat{H}\,|n\rangle &= \left\{\hat{H}_0 + \epsilon\hat{V}\right\}|n\rangle \\ &= \hat{H}_0\,|n^{(0)}\rangle + \epsilon\left\{\hat{H}_0\,|n^{(1)}\rangle + \hat{V}\,|n^{(0)}\rangle\right\} + \epsilon^2\left\{\hat{H}_0\,|n^{(2)}\rangle + \hat{V}\,|n^{(1)}\rangle\right\} + \epsilon^3\left\{\hat{H}_0\,|n^{(3)}\rangle + \hat{V}\,|n^{(2)}\rangle\right\} + \cdots\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\lambda_n\,|n\rangle &= \left(\lambda_n^{(0)} + \epsilon\lambda_n^{(1)} + \epsilon^2\lambda_n^{(2)} + \cdots\right)\cdot\left(|n^{(0)}\rangle + \epsilon\,|n^{(1)}\rangle + \epsilon^2\,|n^{(2)}\rangle + \cdots\right) \\ &= \lambda_n^{(0)}\,|n^{(0)}\rangle + \epsilon\left\{\lambda_n^{(0)}\,|n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(1)}\,|n^{(0)}\rangle\right\} + \epsilon^2\left\{\lambda_n^{(0)}\,|n^{(2)}\rangle + \lambda_n^{(1)}\,|n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(2)}\,|n^{(0)}\rangle\right\} + \cdots .\end{aligned}$$

ϵ の任意性より，ϵ の冪乗が同一の項は相等しいはずだから，

$$\epsilon^0 \;:\; \hat{H}_0\,|n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)}\,|n^{(0)}\rangle \ , \tag{2.4}$$
$$\epsilon^1 \;:\; \hat{H}_0\,|n^{(1)}\rangle + \hat{V}\,|n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)}\,|n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(1)}\,|n^{(0)}\rangle \ , \tag{2.5}$$
$$\epsilon^2 \;:\; \hat{H}_0\,|n^{(2)}\rangle + \hat{V}\,|n^{(1)}\rangle = \lambda_n^{(0)}\,|n^{(2)}\rangle + \lambda_n^{(1)}\,|n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(2)}\,|n^{(0)}\rangle \tag{2.6}$$
$$\cdots\cdots$$

という関係が得られる．

2.1.1 ϵ 一次のオーダまでの計算

ϵ 一次のオーダまでの計算を実行する．一次のオーダまでなので，解きたい問題は $\hat{H} := \hat{H}_0 + \epsilon\hat{V}$ のもとでの

$$\hat{H}\,|n\rangle = \lambda_n\,|n\rangle \ ,$$
$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \epsilon\,|n^{(1)}\rangle + O(\epsilon^2) \ , \tag{2.7}$$
$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \epsilon\lambda_n^{(1)} + O(\epsilon^2) \ , \tag{2.8}$$

である．そしてその上で式 (2.4) と式 (2.5) が対象になる．

そもそも，式 (2.4) は摂動項 $\epsilon\hat{V}$ がない時の固有値方程式であるのだから，無条件に成立を認めて良いものである．

式 (2.5) はどうか．$|n^{(1)}\rangle$ の得体がよくわからない．それを求めるために，ベクトルを揃えて書き直すと

$$(2.5) \quad\Longleftrightarrow\quad \left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}|n^{(1)}\rangle = \left\{\lambda_n^{(1)} - \hat{V}\right\}|n^{(0)}\rangle \ . \tag{2.9}$$

ここで，$|n^{(1)}\rangle$ を，(2.2) の射影演算子を利用して $\hat{H}_0$ の正規直交完全基底ベクトルで展開する．和のダミー変数に注意して

$$\begin{aligned}|n^{(1)}\rangle &= |0^{(0)}\rangle\,\langle 0^{(0)}|n^{(1)}\rangle + |1^{(0)}\rangle\,\langle 1^{(0)}|n^{(1)}\rangle + |2^{(0)}\rangle\,\langle 2^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \cdots \\ &= \sum_{m=0}^{\infty}|m^{(0)}\rangle\,\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle =: \sum_{m=0}^{\infty}C_{mn}^{01}\,|m^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{2.10}$$

を得る[10]．これを用いれば，

$$\begin{aligned}\left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}|n^{(1)}\rangle &= \left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}\sum_m C_{mn}^{01}\,|m^{(0)}\rangle = \sum_m\left\{C_{mn}^{01}\hat{H}_0\,|m^{(0)}\rangle - C_{mn}^{01}\lambda_n^{(0)}\,|m^{(0)}\rangle\right\} \\ &= \sum_m\left\{C_{mn}^{01}\lambda_m^{(0)}\,|m^{(0)}\rangle - C_{mn}^{01}\lambda_n^{(0)}\,|m^{(0)}\rangle\right\} = \sum_m C_{mn}^{01}\left(\lambda_m^{(0)} - \lambda_n^{(0)}\right)|m^{(0)}\rangle\end{aligned}$$

[10] $a =: b$ は，「a を b と置く」の略記．つまり，$\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle =: C_{mn}^{01}$ としたのである．また，ここからは，$\sum$ 記号の和の範囲について，$\sum_{m=0}^{\infty} =: \sum_m$ と略記する．

したがって，式 (2.9) は，

$$\sum_m C^{01}_{mn}\left(\lambda^{(0)}_m-\lambda^{(0)}_n\right)|m^{(0)}\rangle=\left\{\lambda^{(1)}_n-\hat{V}\right\}|n^{(0)}\rangle$$

となる．ここで，$\lambda^{(1)}_n$ の正体を見極めるために，天下り的ながら，このベクトルの $|k^{(0)}\rangle$ 方向の成分を計算してみる[11]．計算は，$|k^{(0)}\rangle$ と内積をとればよい．(2.1) を利用していいのだから，

$$\begin{aligned}
&\sum_m C^{01}_{mn}\left(\lambda^{(0)}_m-\lambda^{(0)}_n\right)\langle k^{(0)}|m^{(0)}\rangle=\langle k^{(0)}|\left\{\lambda^{(1)}_n-\hat{V}\right\}|n^{(0)}\rangle\\
\therefore\ &\sum_m C^{01}_{mn}\left(\lambda^{(0)}_m-\lambda^{(0)}_n\right)\langle k^{(0)}|m^{(0)}\rangle=\lambda^{(1)}_n\langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle-\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\\
\therefore\ &\sum_m C^{01}_{mn}\left(\lambda^{(0)}_m-\lambda^{(0)}_n\right)\delta(k,m)=\lambda^{(1)}_n\delta(k,n)-\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\\
\therefore\ &C^{01}_{kn}\left(\lambda^{(0)}_k-\lambda^{(0)}_n\right)=\lambda^{(1)}_n\delta(k,n)-\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\\
\therefore\ &\begin{cases} C^{01}_{kn}=\dfrac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\lambda^{(0)}_n-\lambda^{(0)}_k} & (\text{where } k\neq n)\\ \lambda^{(1)}_n=\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle & (\text{where } k=n)\end{cases}
\end{aligned}$$

ともとまる．見て分かるように，$\lambda^{(1)}_n$ にはもはや k に対する依存性はない．

C^{01}_{nn} については，$k=n$ の場合から分かるように，ここまでの議論ではこれを決定する根拠となるものがない．しかしながら，少なくとも，純虚数であることは，規格化の条件を利用して次のようにして示すことができる．まず，$|n\rangle$ 自身の内積から（ϵ の一次のオーダーまでで）

$$\begin{aligned}
\langle n|n\rangle&=\left(\langle n^{(0)}|+\epsilon\langle n^{(1)}|+O(\epsilon^2)\right)\cdot\left(|n^{(0)}\rangle+\epsilon|n^{(1)}\rangle+O(\epsilon^2)\right)\\
&=\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle+\epsilon\left(\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle+\langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle\right)+O(\epsilon^2)=1+\epsilon\left(\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle+\langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle\right)+O(\epsilon^2)
\end{aligned}$$

となるから（途中 $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle=1$ をもちいた）

$$\langle n|n\rangle=1\quad\Longleftrightarrow\quad\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle+\langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle=0 \tag{2.11}$$

となる．式 (2.11) において内積のエルミート性を用いれば，

$$\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle+\langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle=0\quad\Longleftrightarrow\quad\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle+\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle^*=0\quad\Longleftrightarrow\quad C^{01}_{nn}+\left(C^{01}_{nn}\right)^*=0$$

となり，この結果から純虚数でなければならないことがわかる[12]．以上，符号と分母を調整してまとめると，

$$\begin{cases} C^{01}_{kn}=\dfrac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\lambda^{(0)}_n-\lambda^{(0)}_k} & (\text{where } k\neq n)\\ C^{01}_{nn}\text{は不定ではあるが，純虚数でなければならない}\\ \lambda^{(1)}_n=\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\end{cases}$$

となる．この結果を式 (2.7)，(2.8) にあてはめて，

$$\lambda_n=\lambda^{(0)}_n+\epsilon\lambda^{(1)}_n+O(\epsilon^2)=\lambda^{(0)}_n+\epsilon\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle+O(\epsilon^2)\,,$$

$$\begin{aligned}
|n\rangle&=|n^{(0)}\rangle+\epsilon|n^{(1)}\rangle+O(\epsilon^2)\\
&=|n^{(0)}\rangle+\epsilon\sum_m|m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle+O(\epsilon^2)=|n^{(0)}\rangle+\epsilon\sum_m C^{01}_{mn}|m^{(0)}\rangle+O(\epsilon^2)\\
&=|n^{(0)}\rangle+\epsilon\left\{\left(\sum_{m,m\neq n}\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\lambda^{(0)}_n-\lambda^{(0)}_m}|m^{(0)}\rangle\right)+C^{01}_{nn}|n^{(0)}\rangle\right\}+O(\epsilon^2)
\end{aligned}$$

[11] なにをどうすればこのようなことが思いつくか．じっと数式を睨むだけで出てくるのか？

[12] 朝永は固有関数に複素数値を返す関数を対象にしているのでこうなる．永宮の本 [2, p.247] では実数値関数しか使っていないので，結果 $C^{01}_{nn}=0$ となるような記述になっている（永宮本の記号では $a_{nn}=0$）.

となるということが得られる[13].

2.1.2 ϵ 二次のオーダまでの計算

ϵ 二次のオーダまでの計算を実行する．解きたい問題は $\hat{H} := \hat{H}_0 + \epsilon \hat{V}$ のもとでの

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = \lambda_n \left|n\right\rangle \ ,$$

$$\left|n\right\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \epsilon \left|n^{(1)}\right\rangle + \epsilon^2 \left|n^{(2)}\right\rangle + O(\epsilon^3) \ , \tag{2.12}$$

$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \epsilon \lambda_n^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_n^{(2)} + O(\epsilon^3) \ , \tag{2.13}$$

である．そしてその上で式 (2.4) と式 (2.6) が対象になる．

式 (2.6) に対しても前節と同様の手順を踏む．ベクトルを揃えて書き直すと

$$(2.6) \quad \Longleftrightarrow \quad \left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}\left|n^{(2)}\right\rangle + \left\{\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right\}\left|n^{(1)}\right\rangle = \lambda_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \ .$$

$\left|n^{(2)}\right\rangle$ を正規直交完全基底ベクトルで展開して

$$\left|n^{(2)}\right\rangle = \sum_m \left|m^{(0)}\right\rangle \left\langle m^{(0)}\middle|n^{(2)}\right\rangle =: \sum_m C_{mn}^{02}\left|m^{(0)}\right\rangle$$

を獲得しておいて，式 (2.10) で求めていた $\left|n^{(1)}\right\rangle$ も同時にもちいれば,

$$\begin{aligned}
&\left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}\left|n^{(2)}\right\rangle + \left\{\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right\}\left|n^{(1)}\right\rangle = \lambda_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \\
\therefore\ &\left\{\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right\}\sum_m C_{mn}^{02}\left|m^{(0)}\right\rangle + \left\{\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right\}\sum_m C_{mn}^{01}\left|m^{(0)}\right\rangle = \lambda_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \\
\therefore\ &\left(\sum_m C_{mn}^{02}\left(\hat{H}_0 - \lambda_n^{(0)}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\right) + \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left(\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\right) = \lambda_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \\
\therefore\ &\left(\sum_m C_{mn}^{02}\left(\lambda_m^{(0)} - \lambda_n^{(0)}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\right) + \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left(\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\right) = \lambda_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle
\end{aligned}$$

と展開できる．$\left|k^{(0)}\right\rangle$ と内積をとり，正規直交関係を利用すると,

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_m C_{mn}^{02}\left(\lambda_m^{(0)} - \lambda_n^{(0)}\right)\left\langle k^{(0)}\middle|m^{(0)}\right\rangle\right) + \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left\langle k^{(0)}\right|\left(\hat{V} - \lambda_n^{(1)}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\right) = \lambda_n^{(2)}\left\langle k^{(0)}\middle|n^{(0)}\right\rangle \\
\therefore\ &C_{kn}^{02}\left(\lambda_k^{(0)} - \lambda_n^{(0)}\right) + \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left\langle k^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|m^{(0)}\right\rangle\right) - C_{kn}^{01}\lambda_n^{(1)} = \lambda_n^{(2)}\delta(k,n) \\
\therefore\ &\begin{cases}
C_{kn}^{02} = \dfrac{1}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_k^{(0)}}\left(\left(\sum_m C_{mn}^{01}\left\langle k^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|m^{(0)}\right\rangle\right) - C_{kn}^{01}\lambda_n^{(1)}\right) & (\text{where } k \neq n) \\
\lambda_n^{(2)} = \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left\langle n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|m^{(0)}\right\rangle\right) - C_{nn}^{01}\lambda_n^{(1)} & (\text{where } k = n)
\end{cases}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

という結果が得られる．

ここで $\sum$ について少々技巧的な処置を進める．脚注 13 の考察と同様で，$k = n$ の時には定まらない C_{kn}^{01} を $\sum$ の中から取り除いておこうというのがその動機である．はじめに $\lambda_n^{(2)}$ からおこなう．$\lambda_n^{(1)} = \left\langle n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|n^{(0)}\right\rangle$ であったので,

$$\lambda_n^{(2)} = \left(\sum_m C_{mn}^{01}\left\langle n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|m^{(0)}\right\rangle\right) - C_{nn}^{01}\left\langle n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|n^{(0)}\right\rangle$$

---

[13] C_{nn}^{01} は，不定であり，また具体的な「ほどいた」形で書けば分母が 0 になる特別なものであることがわかる．それを明示するために，最後の式変形で $\sum$ の和の範囲から C_{nn}^{01} を除き，外出しにした．

となるけれども，右辺の第 1 項の $\sum$ は m での和をとるものであって，その中には $m = n$ の場合の項 $C^{01}_{nn} \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$ も存在しているはずである．さらに右辺第 2 項は，それを引くと主張している．したがって，第 1 項でそれを除いたものの和として記述するようにすればよいだろう．これをまとめて

$$\lambda^{(2)}_n = \sum_{m, m \neq n} C^{01}_{mn} \langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle$$

と表記する．C^{01}_{mn} を代入すれば，

$$\lambda^{(2)}_n = \sum_{m, m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_m} .$$

つぎに，C^{02}_{kn} に移る（C^{02}_{kn} は $k \neq n$ の時に定義されているものであったことに留意しておこう）．まず $\sum_m C^{01}_{mn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle$ において，和の中から $m = k$，$m = n$ のものを取り出し，$\sum$ の表記を上述の様に工夫して

$$\sum_m C^{01}_{mn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle = \left(\sum_{m, m \neq k, n} C^{01}_{mn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \right) + C^{01}_{kn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle + C^{01}_{nn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle .$$

この結果と，$\lambda^{(1)}_n = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$ という事実を用いれば式 (2.14) の C^{02}_{kn} は

$$\begin{aligned}
C^{02}_{kn} &= \frac{1}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} \left\{ \left(\sum_{m, m \neq k, n} C^{01}_{mn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \right) + C^{01}_{kn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle + C^{01}_{nn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle - C^{01}_{kn} \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \right\} \\
&= \frac{1}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} \left\{ \left(\sum_{m, m \neq k, n} C^{01}_{mn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \right) + C^{01}_{kn} \left(\langle k^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle - \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \right) + C^{01}_{nn} \langle k^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \right\}
\end{aligned}$$

となる．ここで表記が長くなるのを避けるために，

$$V^0_{ij} := \langle i^{(0)} | \hat{V} | j^{(0)} \rangle \quad (i,\ j \text{ は } 0 \text{ を含む任意の自然数})$$

と書き表すことにしよう．この表記を採用すれば，すでに導出しておいた C^{01}_{kn} は

$$C^{01}_{kn} = \frac{\langle k^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} = \frac{V^0_{kn}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} \quad (\text{ただし } k \neq n)$$

とあらわせるから，

$$\begin{aligned}
C^{02}_{kn} &= \frac{1}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} \left\{ \left(\sum_{m, m \neq k, n} \frac{V^0_{mn} V^0_{km}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_m} \right) + \frac{V^0_{kn} \left(V^0_{kk} - V^0_{nn} \right)}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} + C^{01}_{nn} V^0_{kn} \right\} \\
&= \left(\sum_{m, m \neq k, n} \frac{V^0_{mn} V^0_{km}}{\left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k \right) \left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_m \right)} \right) + \frac{V^0_{kn} \left(V^0_{kk} - V^0_{nn} \right)}{\left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k \right)^2} + C^{01}_{nn} \frac{V^0_{kn}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

を得る．

前節の C^{01}_{nn} と同様に，不定ではあるけれども，C^{02}_{nn} が満たすべき条件がある．$|n\rangle$ 自身の内積から

$$\begin{aligned}
\langle n | n \rangle &= \left(\langle n^{(0)} | + \epsilon \langle n^{(1)} | + \epsilon^2 \langle n^{(2)} | + O(\epsilon^3) \right) \cdot \left(| n^{(0)} \rangle + \epsilon | n^{(1)} \rangle + \epsilon^2 | n^{(2)} \rangle + O(\epsilon^3) \right) = 1 \\
&= \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle + \epsilon \left(\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle \right) + \epsilon^2 \left(\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(2)} | n^{(0)} \rangle \right) + O(\epsilon^3) \\
&= 1 + \epsilon \left(\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle \right) + \epsilon^2 \left(\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(2)} | n^{(0)} \rangle \right) + O(\epsilon^3)
\end{aligned}$$

であるので

$$\langle n | n \rangle = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} (1)\text{: } \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = 0 \\ \quad \text{かつ} \\ (2)\text{: } \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(2)} | n^{(0)} \rangle = 0 \end{cases} \tag{2.16}$$

とならなければならない．(1) については，前節で見たとおりである．(2) については，今までの計算過程により，$\langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle = C^{02}_{nn}$，$\langle n^{(2)}|n^{(0)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle^* = \left(C^{02}_{nn}\right)^*$ であり，

$$\begin{aligned}\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle &= \left(\sum_m \left(C^{01}_{mn}\right)^* \langle m^{(0)}|\right)\cdot\left(\sum_k C^{01}_{kn}\,|k^{(0)}\rangle\right) = \sum_m\sum_k \left(C^{01}_{mn}\right)^* C^{01}_{kn}\,\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle \\ &= \sum_m\sum_k \left(C^{01}_{mn}\right)^* C^{01}_{kn}\delta(m,k) = \sum_m \left(C^{01}_{mn}\right)^* C^{01}_{mn}\end{aligned}$$

であるから，

$$(2.16)(2) \quad\Longleftrightarrow\quad C^{02}_{nn} + \left(C^{02}_{nn}\right)^* + \sum_m \left(C^{01}_{mn}\right)^* C^{01}_{mn} = 0$$

という条件がついていることがわかる．まとめると，

$$\begin{cases} C^{02}_{kn} = (2.15) \\ C^{02}_{nn}\text{は不定ではあるが，}\ C^{02}_{nn} + \left(C^{02}_{nn}\right)^* + \displaystyle\sum_m \left(C^{01}_{mn}\right)^* C^{01}_{mn} = 0\ \text{を満たさねばならない} \\ \lambda^{(2)}_n = \displaystyle\sum_{m,m\neq n} \frac{V^0_{mn}V^0_{nm}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_m} \end{cases}$$

となる．

ややこしい計算であった．この結果を式 (2.12)，(2.13) にあてはめて，

$$\lambda_n = \lambda^{(0)}_n + \epsilon\lambda^{(1)}_n + \epsilon^2\lambda^{(2)}_n + O(\epsilon^3) = \lambda^{(0)}_n + \epsilon V^0_{nn} + \epsilon^2 \sum_{k,k\neq n} \frac{V^0_{kn}V^0_{nk}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k} + O(\epsilon^3)$$

$$\begin{aligned}|n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \epsilon\left\{\left(\sum_{k,k\neq n} C^{01}_{kn}\,|k^{(0)}\rangle\right) + C^{01}_{nn}\,|n^{(0)}\rangle\right\} + \epsilon^2\left\{\left(\sum_{k,k\neq n} C^{02}_{kn}\,|k^{(0)}\rangle\right) + C^{02}_{nn}\,|n^{(0)}\rangle\right\} + O(\epsilon^3) \\ &= |n^{(0)}\rangle + \epsilon\left\{\sum_{k,k\neq n}\frac{V^0_{kn}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k}\,|k^{(0)}\rangle + C^{01}_{nn}\,|n^{(0)}\rangle\right\} \\ &\quad + \epsilon^2\left\{\sum_{k,k\neq n}\left(\left(\sum_{m,m\neq k,n}\frac{V^0_{km}V^0_{mn}}{\left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k\right)\left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_m\right)}\right) + \frac{V^0_{kn}\left(V^0_{kk} - V^0_{nn}\right)}{\left(\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k\right)^2} + C^{01}_{nn}\frac{V^0_{kn}}{\lambda^{(0)}_n - \lambda^{(0)}_k}\right)|k^{(0)}\rangle + C^{02}_{nn}\,|n^{(0)}\rangle\right\} \\ &\quad + O(\epsilon^3)\end{aligned}$$

となる．結構とんでもない計算結果である．

2.2 $\hat{V}$ の例

ここまで見てきたように，この固有値方程式にたいする摂動計算の場合には，最終的には $\hat{V}$ の働き，つまり．$\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$ がもとまらなければ，具体的な結果は得られない．先の二次方程式の摂動計算とはそこがちがう．$\hat{V}$ は，摂動の方法論とは別に，いいかえれば，他のなんらかの条件のもとで「外的に決まる」または「仮定する」ものなのである．

たとえば物理の方面では，原子核の問題に対して，核力（$\hat{H}$）とその核を構成する陽子のクーロン力（$\hat{V}$）を考え，クーロン力を摂動として扱う，という例がある（メシアの量子力学の本 [3] に詳しい)．

2.3 summary

計算が複雑であったので，要点をサマライズしておく．

- すでに解けている固有値方程式：

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_0 |m^{(0)}\rangle = \lambda_m^{(0)} |m^{(0)}\rangle , \quad \hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle , \quad \ldots , \\
&\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = \delta(m,n) , \\
&\hat{1} = \sum_n |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|
\end{aligned}$$

- 解きたい，摂動項を加えた固有値方程式：

$$\begin{aligned}
&\hat{H} := \hat{H}_0 + \epsilon \hat{V} , \\
&\hat{H} |n\rangle = \lambda_n |n\rangle \ .
\end{aligned}$$

- 摂動の常道的奥義：

$$\begin{aligned}
&\lambda_n \approx \lambda_n^{(0)} + \epsilon \lambda_n^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_n^{(2)} + \cdots , \\
&|n\rangle \approx |n^{(0)}\rangle + \epsilon |n^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |n^{(2)}\rangle + \cdots ,
\end{aligned}$$

- ϵ の冪で揃えての恒等式：

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \ , \\
&\hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle + \hat{V} |n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle \ , \\
&\hat{H}_0 |n^{(2)}\rangle + \hat{V} |n^{(1)}\rangle = \lambda_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle + \lambda_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle \ .
\end{aligned}$$

- 解法の手順：
  * $|n^{(1)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle =: \sum_m C_{mn}^{01} |m^{(0)}\rangle$ として，

$$\begin{cases}
C_{kn}^{01} = \dfrac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_k^{(0)}} \quad (\text{where } k \neq n) \\
C_{nn}^{01} \text{は不定ではあるが，純虚数でなければならない} \\
\lambda_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle
\end{cases}$$

  * $|n^{(2)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|n^{(2)}\rangle =: \sum_m C_{mn}^{02} |m^{(0)}\rangle$ として，

$$\begin{cases}
C_{kn}^{02} = (2.15) \\
C_{nn}^{02} \text{は不定ではあるが，} C_{nn}^{02} + \left(C_{nn}^{02}\right)^* + \sum_m \left(C_{mn}^{01}\right)^* C_{mn}^{01} = 0 \text{ を満たさねばならない} \\
\lambda_n^{(2)} = \displaystyle\sum_{m, m \neq n} \frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|\hat{V}|m^{(0)}\rangle}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}}
\end{cases}$$

参考文献

[1] 朝永 振一郎．『角運動量とスピン』．株式会社みすず書房, 1989．（第 7 刷（1999）を参照した）．

[2] 永宮 健夫．『応用微分方程式論』．共立出版株式会社, 1967．（第 5 刷（1978）を参照した）．

[3] A. メシア．『メシア量子力学 3』．東京図書株式会社, 1972．（第 8 刷（1981）を参照した）．

目次