(無限井戸型ポテンシャル系における摂動１)perturbation-infwell1-qa20150630B.tex

１次元の領域 $(0 < x < a)$ のみ値がゼロで、他は無限大となるポテンシャル系においては、質量 m の粒子の n 番目の量子状態のエネルギー $E_n^{(0)}$ と直交規格化された (無摂動の) 波動関数 (固有状態) $\psi_n^{(0)}(x)$ は

$$E_n^{(0)} = \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)n^2,\ \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{1}$$

のように表される。位置座標 x に比例する摂動 $\hat{V} = V_0 \cdot x$ (V_0 : 定数) が働く場合

(a) １次の摂動エネルギー $E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle$ を計算せよ。

(b) １次の摂動において、n 番目のエネルギーの近似式を記し、その特徴を述べよ。

ただし、次の積分公式を使ってよい。

$$\begin{aligned} I_k &\equiv \int_0^a x^k \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx,\ (k = 0, 1, 2) \\ I_0 &= \frac{a}{2},\ I_1 = \frac{a^2}{4},\ I_2 = \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{4n^2\pi^2}\right)a^3. \end{aligned} \tag{2}$$

(解答例)

(a) 題意より１次の摂動エネルギー $E_n^{(1)}$ は次のように表される。

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle\psi_n^{(0)}|\hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle \equiv \int_0^a \psi_n^{(0)*}(x)\hat{V}\psi_n^{(0)}(x)dx \\ &= \left(\frac{2V_0}{a}\right)\int_0^a x \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx. \end{aligned} \tag{3}$$

ここで積分公式 (2) を用いて式 (3) は次のように書き直せる。したがって、１次の摂動エネルギーは次のように得られる。

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \left(\frac{2V_0}{a}\right)\cdot\frac{a^2}{4} \\ &= \frac{aV_0}{2}. \end{aligned} \tag{4}$$

(b) １次の摂動で n 番目のエネルギーの近似式は次のように得られる。

$$\begin{aligned} E_n &\approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \\ &= \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)n^2 + \frac{aV_0}{2}. \end{aligned} \tag{5}$$

今の場合、１次の摂動エネルギーは n の値（量子数）には依存しない。すなわち、すべてのエネルギー準位は $aV_0/2$ だけずれ、励起エネルギー間隔は摂動なしの場合と同じである。

1. 補足: 位置座標 x に比例する摂動の実例は一定の強さの電界（電場）などがある。一般に電場がかかるとエネルギー準位にずれが生じ、シュタルク（Stark）効果として知られている。ここで取り扱った性質は 1 次のシュタルク効果と言われる。

2. 積分公式の一部の証明：

$$\begin{aligned}\int_0^a x \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= \frac{1}{2}\int_0^a x\left[1-\cos(\frac{2n\pi x}{a})\right] dx \\ &= \left[\frac{x^2}{4}\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{1}{2}\int_0^a x\cdot\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx. \end{aligned} \tag{6}$$

さらに、式（6）の積分は部分積分の公式より

$$\begin{aligned}\int_0^a x\cdot\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx &= (\frac{a}{2n\pi})\int_0^a x\cdot\frac{d}{dx}\left[\sin(\frac{2n\pi x}{a})\right] dx \\ &= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)\left[x\cdot\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \\ &= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\left[\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} \\ &= 0. \end{aligned} \tag{7}$$

と計算される。結局、式（6）は

$$\int_0^a x\cdot\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^2}{4} \tag{8}$$

となる。