1 次元の領域 $(0 \le x \le a)$ 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) $\psi_n^{(0)}(x)$ は次のように表される。

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

(a) 摂動 $\hat{V} = V_0 \cdot (x - a/2)^2$ $(V_0$: 定数) が働く場合に 1 次の摂動エネルギー $E_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle$ 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)

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n|\hat{V}|n\rangle \equiv \int_0^a \psi_n^{(0)*}(x)\hat{V}\psi_n^{(0)}(x)dx \\ &= \left(\frac{2V_0}{a}\right)\int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \\ &= \left(\frac{2V_0}{a}\right)\left[\int_0^a x^2\ \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx - a\int_0^a x\ \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx + \frac{a^2}{4}\int_0^a\ \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx\right] \end{aligned} \tag{3}$$

ここで 式 (3) に積分公式 (2) の値を代入すると

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \frac{2V_0}{a}\left(\frac{a^3}{6} - \frac{a^3}{4n^2\pi^2} - \frac{a^3}{4} + \frac{a^3}{8}\right) \\ &= \frac{a^2V_0}{2}\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{n^2\pi^2}\right). \end{aligned} \tag{4}$$

(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。

$$\begin{aligned} E_n &\approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \\ &= \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)n^2 + \frac{a^2V_0}{2}\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{n^2\pi^2}\right). \end{aligned} \tag{5}$$

n の値（量子状態）に依存した摂動エネルギーとなり、摂動の結果、励起エネルギー間隔も変化する。

備考：

$$
\begin{aligned}
I_0 &\equiv \int_0^a \sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx = \frac{1}{2}\int_0^a \left[1-\cos(\frac{2n\pi x}{a})\right] = \frac{a}{2}, \qquad (6)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_1 &\equiv \int_0^a x\ \sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx = \frac{1}{2}\int_0^a x[1-\cos(\frac{2n\pi x}{a})]dx \\
&= \left[\frac{x^2}{4}\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{1}{2}\int_0^a x\ \cos(\frac{2n\pi x}{a})dx. \qquad (7)
\end{aligned}
$$

この積分は部分積分の公式より

$$
\begin{aligned}
\int_0^a x\ \cos(\frac{2n\pi x}{a})dx &= (\frac{a}{2n\pi})\int_0^a x\ \frac{d}{dx}\left[\sin(\frac{2n\pi x}{a})\right]dx \\
&= (\frac{a}{2n\pi})\left[x\ \sin(\frac{2n\pi x}{a})\right]_{x=0}^{x=a} - (\frac{a}{2n\pi})\int_0^a \sin(\frac{2n\pi x}{a})dx \\
&= (\frac{a}{2n\pi})^2\left[\cos(\frac{2n\pi x}{a})\right]_{x=0}^{x=a} = 0, \\
I_1 &= \frac{a^2}{4}. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_2 &\equiv \int_0^a x^2\ \sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx = \frac{1}{2}\int_0^a x^2[1-\cos(\frac{2n\pi x}{a})]dx \\
&= \left[\frac{x^3}{6}\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{1}{2}\int_0^a x^2\ \cos(\frac{2n\pi x}{a})dx. \qquad (9)
\end{aligned}
$$

同様に、この積分は部分積分の公式より

$$
\begin{aligned}
\int_0^a x^2\ \cos(\frac{2n\pi x}{a})dx &= (\frac{a}{2n\pi})\int_0^a x^2\ \frac{d}{dx}\left[\sin(\frac{2n\pi x}{a})\right]dx \\
&= (\frac{a}{2n\pi})\left[x^2\ \sin(\frac{2n\pi x}{a})\right]_{x=0}^{x=a} - (\frac{a}{2n\pi})\int_0^a 2x\ \sin(\frac{2n\pi x}{a})dx \\
&= 2(\frac{a}{2n\pi})^2\int_0^a x\ \frac{d}{dx}\left[\cos(\frac{2n\pi x}{a})\right]dx \\
&= \frac{a^2}{2n^2\pi^2}\left[x\ \cos(\frac{2n\pi x}{a})\right]_{x=0}^{x=a} - (\frac{a^2}{2n^2\pi^2})\int_0^a \cos(\frac{2n\pi x}{a})dx \\
&= (\frac{a^3}{2n^2\pi^2}) - (\frac{a^2}{2n^2\pi^2})(\frac{a}{2n\pi})\left[\ \sin(\frac{2n\pi x}{a})\right]_{x=0}^{x=a} = \frac{a^3}{2n^2\pi^2}, \\
I_2 &= \frac{a^3}{6} - \frac{a^3}{4n^2\pi^2}. \qquad (10)
\end{aligned}
$$