

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

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (1)$$

のように表される。位置座標 x に比例する摂動 $\hat{H}' = V_0 \cdot x$ (V_0 : 定数) が働く場合、1次の摂動エネルギー $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$ を計算せよ。

(解答例) 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。

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

ここで積分は次のように書き直せる。

$$\begin{aligned} \int_0^a x \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= \frac{1}{2} \int_0^a x \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx \\ &= \left[\frac{x^2}{4}\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{1}{2} \int_0^a x \cdot \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx. \end{aligned} \quad (3)$$

さらに、式 (3) の積分は部分積分の公式より

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

と計算される。結局、式 (3) は

$$\int_0^a x \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^2}{4} \quad (5)$$

となる。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。

$$E_n^{(1)} = \frac{aV_0}{2}. \quad (6)$$

(補足)

今の場合、1 次の摂動エネルギーは n の値 (量子数) には依存しないことに注意する。すなわち、すべてのエネルギー準位は $aV_0/2$ だけずれる。

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。