

1次元の領域 ( $0 \leq x \leq a$ ) 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

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

である。摂動  $\hat{H}' = V_0 \cdot (x - a/2)^2$  ( $V_0$  : 定数) が働く場合に 1 次の摂動エネルギー  $E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle$  を計算せよ。

(解答例)

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

ここで積分の値を計算する。

$$I_0 \equiv \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2} \int_0^a \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx = \frac{a}{2}, \quad (3)$$

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

この積分は部分積分の公式より

$$\begin{aligned} \int_0^a x \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx &= \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \int_0^a x \frac{d}{dx} \left[\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx \\ &= \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \left[x \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \\ &= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \left[\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = 0, \\ I_1 &= \frac{a^2}{4}. \quad (5) \end{aligned}$$

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

同様に、この積分は部分積分の公式より

$$\int_0^a x^2 \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx = \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \int_0^a x^2 \frac{d}{dx} \left[\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \left[ x^2 \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \int_0^a 2x \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \\
&= 2\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \int_0^a x \frac{d}{dx} \left[ \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right] dx \\
&= \frac{a^2}{2n^2\pi^2} \left[ x \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a^2}{2n^2\pi^2}\right) \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \\
&= \left(\frac{a^3}{2n^2\pi^2}\right) - \left(\frac{a^2}{2n^2\pi^2}\right) \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \left[ \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_{x=0}^{x=a} = \frac{a^3}{2n^2\pi^2}, \\
I_2 &= \frac{a^3}{6} - \frac{a^3}{4n^2\pi^2}. \tag{7}
\end{aligned}$$

以上の結果を用いて

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

$n$  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が変化する。