

ここでは、2次摂動を用いた例題として Stark 効果¹²を考えよう。

例題 0.1: 量子閉じ込め Stark 効果

定常状態のハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ に、電場による摂動 \hat{V} を加えたハミルトニアン \hat{H} を考える。ただし、定常状態のポテンシャルは、長さ L の無限井戸型ポテンシャル \hat{U} である。 \hat{U} , \hat{V} , $\hat{H}^{(0)}$, \hat{H} は、

$$U(x) := \begin{cases} 0 & |x| \leq L/2 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (0.0.1)$$

$$V(x) := -e\phi(x) = eEx \quad (e > 0) \quad (0.0.2)$$

$$\hat{H}^{(0)} := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x) \quad (0.0.3)$$

$$\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(x) \quad (0.0.4)$$

$$(0.0.5)$$

と定義される。また、 $\hat{H}^{(0)}$ の固有エネルギーとそれに属する固有関数は、

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (0.0.6)$$

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{odd} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{even} \end{cases} \quad (0.0.7)$$

のようにになっている。このとき、2次の摂動まで用いて \hat{V} の影響によるエネルギー補正を計算せよ。

1次摂動によるエネルギー補正は奇関数の積分になるため0である。^a

2次摂動によるエネルギー補正は、

$$E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|V_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (0.0.8)$$

$$V_{m1} = eE \int \phi_m^* x \phi_1 dx \quad (0.0.9)$$

$$\begin{cases} = 0 & n : \text{odd} \\ \neq 0 & n : \text{even} \end{cases} \quad (0.0.10)$$

$$E_1^{(2)} = \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|V_{41}|^2}{E_1^{(0)} - E_4^{(0)}} + \dots \quad (0.0.11)$$

$$\approx \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (0.0.12)$$

$$= -\frac{256}{234\pi^4} \frac{(eEL)^2}{E_1^{(0)}} \quad (0.0.13)$$

と計算できて、2次の摂動を考えるとエネルギーは低下することがわかる。

^aもし0でないならば、電場をかける向きによりエネルギーが変わることを意味するが、これは対称性より不合理である。

¹Johanes Stark(1874-1957)

²電場によるエネルギー準位の変化を Stark 効果という。