

真の基底状態 $|E_0\rangle$ に第 1 励起状態 $|E_1\rangle$ を 10% 含んだ試行関数 $|\psi\rangle = |E_0\rangle + \frac{1}{10}|E_1\rangle$ を使ってエネルギーを計算する。

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\ &= \frac{\langle E_0|\hat{H}|E_0\rangle + 1/100 \langle E_1|\hat{H}|E_1\rangle}{1 + 1/100} \\ &= \frac{E_0 + 1/100 E_1}{1.01} \\ &\approx 0.99E_0 + 0.01E_1 \end{aligned}$$

試行関数で 10%含まれていた誤差がエネルギーでは 1%に収まっている。

例題 0.0.1

無限井戸型ポテンシャル $[-a, a]$ 厳密に解くことができるが^a, ここでは変分法を用いて近似解を求める。予想される試行関数の条件は

- $\psi(x = \pm a) = 0$
- 節がない

である。よって今回は

$$\psi(x) = a^2 - x^2$$

を採用する。

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \frac{\int_{-a}^a (a^2 - x^2) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} \\ &= \frac{10}{\pi^2} E_0 \\ &\approx 1.01 E_0 \end{aligned}$$

真の基底エネルギー E_0 に近い値が得られた^a。

^aこのくらいの計算が期末試験に出たことがある。