練習問題 0.1: Griffith Example 8.1

1 次元調和振動子 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の基底エネルギーを見積もれ．ただし，試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-bx^2}$ とせよ．試行関数は規格化されている．

$$E(b) = \langle\psi|\,\hat{H}\,|\psi\rangle = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-bx^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\mathrm{e}^{-bx^2}\,\mathrm{d}x \tag{0.0.1}$$

$$= \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} \tag{0.0.2}$$

次に $E(b)$ の最小値を求める．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}b}E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b_0^2} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{m\omega}{2\hbar} \tag{0.0.3}$$

$$E(b_0) = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{0.0.4}$$

偶然にも試行関数は基底エネルギーの固有関数となっていたため，$E(b_0)$ は基底エネルギーと一致した．

練習問題 0.2: Griffith Example 8.2

デルタ関数型ポテンシャル $\hat{H} - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\delta(x)$ の基底エネルギーを見積もれ．ただし，試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-bx^2}$ とせよ．試行関数は規格化されている．

$$\langle V\rangle = -\alpha\left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-2bx^2}\delta(x)\,\mathrm{d}x = -\alpha\left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \tag{0.0.5}$$

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} \tag{0.0.6}$$

$$E(b) = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha\left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \tag{0.0.7}$$

$E(b)$ の最小値を求める．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}b}E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b_0}} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{2m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4} \tag{0.0.8}$$

よって，基底エネルギーの近似解として

$$E(b_0) = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2} \tag{0.0.9}$$

を得る[a]．

[a] 厳密解を求めることができ，$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\mathrm{e}^{-m\alpha|x|/\hbar^2}$，$E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ である．

練習問題 0.3: Griffith Example 8.3

$[0, a]$ の無限井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを見積もれ．ただし，試行関数を

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{0.0.10}$$

とせよ．

規格化条件より，$A = \dfrac{2}{a}\sqrt{\dfrac{3}{a}}$ を得る．波動関数の導関数は

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{0.0.11}$$

である．よって，2 次の微係数として

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = A\delta(x) - 2A\delta(x - \frac{a}{2}) + A\delta(x-a) \tag{0.0.12}$$

を得る．したがって近似解は

$$E = \int_0^a \psi(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{0.0.13}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a A\left[\delta(x) - \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta(x-a)\right]\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{0.0.14}$$

$$= \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \tag{0.0.15}$$

である[a]．

[a] 厳密解は $E_0 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$