

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。

$$E(\psi) = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (0.0.1)$$

$$= \frac{\langle E_0|\hat{H}|E_0\rangle + \frac{1}{100}\langle E_1|\hat{H}|E_1\rangle}{1 + \frac{1}{100}} \quad (0.0.2)$$

$$= \frac{E_0 + 0.01E_1}{1.01} \quad (0.0.3)$$

$$\approx 0.99E_0 + 0.01E_1 \quad (0.0.4)$$

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 0.1

無限井戸型ポテンシャル $[-a, a]$ を考える。この問題を厳密に解けば n 番目のエネルギー準位は、

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 \quad (0.0.5)$$

と計算できるが、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

- $\psi(a) = \psi(-a) = 0$
- 節がない

である。よって今回は

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \quad (0.0.6)$$

を採用する。この試行関数を用いたときの基底エネルギーを見積もれ。

$$E(\psi) = \frac{\int_{-a}^a (a^2 - x^2) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} \quad (0.0.7)$$

$$= \frac{10}{\pi^2} E_1 \quad (0.0.8)$$

$$\approx 1.01 E_1 \quad (0.0.9)$$

真の基底エネルギー E_1 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。