量子力学 3 演習 (田中担当クラス) 問題 No.3 (2002/10/17)

1. ハミルトニアンが $\hat{H}$ で与えられる系を考える。

   (a) 基底状態 $|0\rangle$ のエネルギーを E_0 とする。任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して、
   $$E[\psi] \equiv \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$
   を示せ。(固有状態 $|k\rangle$ で $|\psi\rangle$ を展開せよ。) 等号の成立条件は何か。

   (b) $|0\rangle, |\psi\rangle$ は規格化されているとして、$|\langle 0|\psi\rangle|^2 = 1 - \varepsilon^2\ (\varepsilon \geq 0)$ と置く。基底状態以外の規格化された固有状態 $|k\rangle\ (k \neq 0)$ に対して、$|\langle k|\psi\rangle| \leq \varepsilon$ であることを示せ。

   (c) 第 1 励起状態のエネルギーを E_1 とすると、$E[\psi] - E_0 \geq \varepsilon^2(E_1 - E_0)$ となることを示せ。

   (d) 基底状態の近似解 $|\psi_0\rangle$ が知られていて、$1 - |\langle 0|\psi\rangle|^2 = \varepsilon_0^2 (\ll 1)$ であるとする。このとき、$|\psi_0\rangle$ に直交する状態 $|\psi_1\rangle$ を試行関数とすれば第 1 励起状態のエネルギーの近似値が求まるであろう。実際、$|\langle 0|\psi_1\rangle|^2 \leq \varepsilon_0^2$ であることを示し、$E[\psi_1] \geq E_1 - \varepsilon_0^2(E_1 - E_0)$ であることを導け。($|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle$ は規格化されているものとする。)

2. 変分法を用いて水素原子の基底準位を (近似的に) 求めてみる。波動関数は、
   $$\psi(\mathbf{x}) = a_0^{-3/2}\frac{u(\rho)}{\rho}Y_0^0(\theta,\phi)\,, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\,, \quad \rho = \frac{r}{a_0}\,, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$
   と書ける。

   (a) 真の基底準位 $E_0 = -e^2/(2a_0)$ を用いて、
   $$E[\psi] = E_0\frac{\displaystyle\int_0^\infty u^*\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right)u\mathrm{d}\rho}{\displaystyle\int_0^\infty |u|^2\mathrm{d}\rho}$$
   と書けることを示せ。

   (b) b を変分パラメーターとする試行関数 $u(\rho) = \rho\exp(-b\rho)$ を用いて基底準位と基底状態の波動関数を求めよ。さらに、1b の ε^2 を求めよ。

   (c) $u(\rho) = \rho/(\rho^2 + b^2)$ について、同様の評価を行なえ。ただし、
   $$\int_0^\infty d\rho\frac{\rho^2 e^{-\rho}}{\rho^2 + (\pi/4)^2} \simeq 0.446$$
   とせよ。

   (d) $u(\rho) = \rho^2\exp(-b\rho)$ について、同様の評価を行なえ。

   (e) 上の 3 つの試行関数で得られた結果について比較、考察せよ。特に波動関数の原点付近と遠方でのふるまいに注意せよ。

3. ハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2\hat{x}^2/2 + \lambda\hat{x}$ で与えられるような系を考える。(λ は実数とする。)

   (a) 試行関数として $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ を用いて基底状態のエネルギーを求めよ。(c_0、c_1 は実数とする。)

   (b) 得られた結果を厳密解と比較せよ。