

(調和振動子—波動関数からエネルギーとポテンシャルの推定
filename=harmonic-poten-qa20190507.tex)

規格化係数を除いた波動関数 $\psi(x) = \exp(-\alpha x^2)$ が与えられている粒子 (質量 m) がシュレディンガー方程式に従うとする。 ($\alpha > 0$.) このとき、ポテンシャル $V(x)$ とエネルギー E を求めよ。プランク定数を h とし、ディラック定数を $\hbar \equiv h/2\pi$ とする。
(解答例)

題意より、この粒子はシュレディンガー方程式に従うので

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

波動関数 $\psi(x) = \exp(-\alpha x^2)$ を微分して、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi(x) &= -2\alpha x \cdot \exp(-\alpha x^2) \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= -2\alpha \cdot \exp(-\alpha x^2) + 4\alpha^2 x^2 \cdot \exp(-\alpha x^2) \end{aligned} \quad (2)$$

(1) 式に代入する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[-2\alpha \cdot \exp(-\alpha x^2) + 4\alpha^2 x^2 \cdot \exp(-\alpha x^2) \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

$$\rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (2\alpha x)^2 + V(x) \right] + \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} - E \right) = 0. \quad (4)$$

ここで、 x の値の如何にかかわらず恒等的に成立するためには、両辺の係数は x についての次数毎に、それぞれゼロにならねばならないので

$$V(x) = \left(\frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) x^2, \quad (5)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{m} \alpha. \quad (6)$$

(補足)

ここで、調和振動子のポテンシャルとして

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (7)$$

とおくと

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad (8)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{m} \times \frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (9)$$

であるように、基底状態のエネルギー (いわゆるゼロ点エネルギー) が求まり、与えられた波動関数は基底状態のものであることがわかる。