

1次元調和振動子の基底状態エネルギーの変分計算

filename=variation-harmonic-ground-stateQA20180712.tex

1次元調和振動子の基底状態エネルギーを試行関数 $\phi_\alpha(x) \equiv Ne^{-\alpha x^2}$ (N :規格化定数) を用いて次の手順で変分法で計算せよ. ただし, 1次元調和振動子のハミルトニアン \hat{H} が

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad (m, \omega > 0, \text{constant}) \quad (1)$$

とあるとして, 次の積分公式を用いてよい.

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} x^{2n} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}, \quad (n = 0, 1, \dots, a > 0). \quad (2)$$

1. 試行的な波動関数としての $\phi_\alpha(x)$ の規格化条件から規格化定数 N と N^2 を計算せよ.
2. ハミルトニアン \hat{H} の期待値を計算せよ.
3. ハミルトニアン \hat{H} の期待値を変分パラメタ α について微分し, ゼロとおき, そのときの α の値とハミルトニアンの期待値を求めよ.

(解答例)

1.

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\alpha^*(x) \phi_\alpha(x) dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\ \rightarrow N &= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}, \quad N^2 = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \quad (\text{ここで } (-1)!! = 1) \end{aligned} \quad (3)$$

2. まず準備として試行関数の微分係数を計算する.

$$\frac{d}{dx} e^{-\alpha x^2} = -2\alpha x e^{-\alpha x^2}, \quad \frac{d^2}{dx^2} e^{-\alpha x^2} = (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha) e^{-\alpha x^2}. \quad (4)$$

次に, 試行関数にハミルトニアンを作用させる.

$$\hat{H}\phi_\alpha(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right) x^2 - 2\alpha \right] e^{-\alpha x^2} N, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\alpha^*(x) \hat{H}\phi_\alpha(x) dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right) N^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx\right) \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha N^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx\right). \end{aligned} \quad (6)$$

ここで, 積分を含む因子に対して, 与えられた公式を用いると

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \quad (7)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \quad (8)$$

さらに、規格化定数の値を用いると

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{\alpha}^*(x) \hat{H} \phi_{\alpha}(x) dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(4\alpha^2 - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right) \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
 &\quad + \frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(4\alpha^2 - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right) \frac{1}{4\alpha} + \frac{\hbar^2}{m} \alpha \\
 &= \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \alpha + \left(\frac{m\omega^2}{8} \right) \frac{1}{\alpha}
 \end{aligned} \tag{9}$$

が得られる。

3. 今の場合、ハミルトニアンの期待値を $E(\alpha)$ とおくと α に比例する項と逆比例する項の和となるので α の関数としては極値 (極小値) をもつ。

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{dE(\alpha)}{d\alpha} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\alpha^2} \\
 \rightarrow \alpha &= \frac{m\omega}{2\hbar},
 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}
 E\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{2\hbar} + \frac{m\omega^2}{8} \frac{2\hbar}{m\omega} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

備考：この例では変分計算による結果が正しい値を与えることになったが、本来は厳密解がわかっていないときの近似解を求めるのが変分法である。