量子力学３　演習問題（３）　担当：井上慎<inouye@sci.osaka-cu.ac.jp>
配布：5 月 8 日(水)
締切：5 月 13 日(月)２限　授業開始時

6.(変分) １次元を運動する粒子を考える。粒子は原点からの距離の４乗に比例したポテンシャル中を運動しているとする。

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + k\hat{x}^4$$

基底状態のエネルギーの近似値を、変分法で求めることを考える。

(i) β をパラメータとしたガウシアン型の試行関数

$$\psi(x) = A\, exp(-(\beta/2)x^2)$$

を用いた時の系のエネルギーの期待値を β の関数として表せ。
必要ならば次の式を用いよ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} exp(-\alpha x^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 exp(-\alpha x^2)dx = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 exp(-\alpha x^2)dx = \frac{3}{4\alpha^2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

(ii) 前問で得られたエネルギーをβに関して最小化することで、基底状態のエネルギーの近似値を求めよ。

7.(変分) 水素原子の基底状態のエネルギーを変分法で近似して求めることを考える。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y{}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z{}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hat{r}}$$

で与えられる。
(i) β をパラメータとしたガウシアン型の試行関数

$$\psi(x) = A\, exp(-(\beta/2)r^2)$$

を用いた時の $\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}$ の期待値を β の関数として表せ。

(ii) 同じ試行関数を用いた時の $-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hat{r}}$ の期待値を β の関数として表せ。

(iii) 系の全エネルギーの期待値を β の関数として表せ。

(iv) (iii)で求めた全エネルギーを最小化する β の値β_0を求めよ。β_0をボーア半径で表せ。

(v) 基底状態のエネルギーの近似値を求めよ。真の基底状態のエネルギーを調べ、得られた近似値と比較せよ。