filename=harmonic-gauss-func-qa110601.tex)
(調和振動子ー指数関数からエネルギーの推定

質量 m の粒子が次のような時間に依存しないシュレーディンガー方程式に従うとする。

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

ただし、ω は正定数である。

1. 波動関数 $\psi(x)=\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ と仮定した場合、この波動関数に対応するエネルギー固有値と係数 α を $m,\hbar,\omega$ のいくつかを用いて表せ。

2. 前問題で求まった定数 α を用いて、再び波動関数を $\psi(x)=x\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ と仮定した場合、この波動関数に対応するエネルギー固有値を求めよ

(解答例)

1. 波動関数 $\psi(x)=\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ を微分して、

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

(1)式に代入する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[-2\alpha\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}+4\alpha^2x^2\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}]+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2}=E\mathrm{e}^{-\alpha x^2} \tag{3}$$

$$\rightarrow\quad\left[-\frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2+\frac{1}{2}m\omega^2\right]x^2+\left(\frac{\hbar^2\alpha}{m}-E\right)=0. \tag{4}$$

ここで x の値の如何にかかわらず成立するためには、両辺の係数は x に依存するものとしないものであるから、それぞれ恒等的にゼロにならねばならない。

$$\alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}\rightarrow\alpha=\frac{m\omega}{2\hbar}, \tag{5}$$

$$E=\frac{\hbar^2}{m}\alpha=\frac{\hbar\omega}{2}. \tag{6}$$

2. 題意より、仮定された波動関数を微分して

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\psi(x)&=\mathrm{e}^{-\alpha x^2}-2\alpha x^2\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\\ \frac{d^2}{dx^2}\psi(x)&=-6\alpha x\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}+4\alpha^2x^3\cdot\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\end{aligned} \tag{7}$$

式（7）を式（1）に代入して、x についてのべき乗について整理すると

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}(-6\alpha x + 4\alpha^2 x^3) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^3 = Ex \\
\rightarrow \quad &\left(\frac{3\hbar^2\alpha}{m} - E\right) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\hbar^{2\alpha^2}}{m}\right)x^2 = 0 \\
&E = \frac{3\hbar^2\alpha}{m} = \frac{3}{2}\hbar\omega. \qquad (8)
\end{aligned}
$$