(調和振動子ー波動関数からエネルギーとポテンシャルの推定
filename=harmonic-poten-qa030604.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 $\hbar$ 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

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

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

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

(1）式に代入する。

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}[-2\alpha \cdot \exp(-\alpha x^2) + 4\alpha^2 x^2 \cdot \exp(-\alpha x^2)] + V(x)\psi(x)&\\ = E\psi(x)& \qquad (3)\\ \rightarrow \qquad [-\frac{\hbar^2}{2m}(2\alpha x)^2 + V(x)]\exp(-\alpha x^2) = (E - \frac{\hbar^2\alpha}{m})\exp(-\alpha x^2).& \qquad (4)\end{aligned}$$

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。

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

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

(補足)
ここで、調和振動子のポテンシャルとして

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

とおくと、

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}, \tag{8}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{m} \times \frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{9}$$

というように、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ったことがわかる。