量子力学 3 演習 No.5 (99/11/11)

1. ハミルトニアンが $\hat{H}$ で与えられる系を考える。
   (a) 基底状態 $|0\rangle$ のエネルギーを E_0 とする。任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して、

$$E[\psi] \equiv \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

   を示せ。(固有状態 $|k\rangle$ で $|\psi\rangle$ を展開せよ。) 等号の成立条件は何か。
   (b) $|\psi\rangle$ は規格化されているとして、$|\langle 0|\psi\rangle|^2 = 1 - \varepsilon^2\ (\varepsilon > 0)$ と置く。基底状態以外の固有状態 $|k\rangle\ (k \neq 0)$ に対して、$|\langle k|\psi\rangle| \leq \varepsilon$ であることを示せ。
   (c) 第 1 励起状態のエネルギーを E_1 とすると、$E[\psi] - E_0 \geq \varepsilon^2(E_1 - E_0)$ となることを示せ。
2. 変分法を用いて水素原子の基底準位を (近似的に) 求めてみる。試行関数として、

$$\psi(\mathbf{x}) = a_0^{-3/2}\frac{u(\rho)}{\rho}Y_0^0(\theta,\phi)$$

   を用いる。ただし、

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\,, \quad \rho = \frac{r}{a_0}\,, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

   である。
   (a) 真の基底準位 $E_0 = -e^2/(2a_0)$ を用いて、

$$E[\psi] = E_0\frac{\displaystyle\int_0^\infty u^*\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right)u\,\mathrm{d}\rho}{\displaystyle\int_0^\infty |u|^2\mathrm{d}\rho}$$

   と書けることを示せ。
   (b) b を変分パラメーターとする $u(\rho) = \rho\exp(-b\rho)$ を用いて基底準位を求めよ。
   (c) 同様に $u(\rho) = \rho/(\rho^2 + b^2)$ として基底準位を求めよ。
3. No.1 の問題 2 の系を考える。すなわち、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}$$

   である。(λ は実数とする。)
   (a) 試行関数として $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ を用いて基底状態のエネルギーを求めよ。(c_0、c_1 は実数とする。)
   (b) 得られた結果を No.1 の問題 2 の結果と比較せよ。
   (c) 捨てた方の解は何に対応しているか。