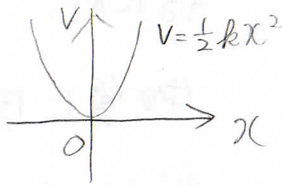
# 変分法 調和振動子

## ☆ 計算条件

・ハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$$




・試行関数

基底状態 $\psi_0 = Ae^{-\frac{1}{2}Bx^2}$

第一励起状態 $\psi_1 = (Cx+B)e^{-\frac{1}{2}Fx^2}$

$\psi_0$と$\psi_1$は直交性を満たすものとする

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\psi_1\,dx = 0$$

・エネルギー

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{H}\psi\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,dx}$$

## ☆ 基底状態

・規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\psi_0\,dx = A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Bx^2}dx$$

$$= A^2\sqrt{\frac{\pi}{B}}$$

$$= 1$$

$$A^2 = \sqrt{\frac{B}{\pi}}$$

(ガウス積分 $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$)

・エネルギー

$$E_0 = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\hat{H}\psi_0\,dx$$

$k = m\omega^2$

$$= A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Bx^2}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-B+B^2x^2\right)+\frac{m\omega^2}{2}x^2\right\}dx$$

$$= \sqrt{\frac{B}{\pi}}\left\{\frac{\hbar^2B}{2m}\sqrt{\frac{\pi}{B}} + \left(-\frac{\hbar^2B^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\right)\frac{1}{2B}\sqrt{\frac{\pi}{B}}\right\}$$

$$= \frac{\hbar^2B}{2m} - \frac{\hbar^2B}{4m} + \frac{m\omega^2}{4B}$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2B}{m} + \frac{m\omega^2}{B}\right)$$

(ガウス積分 $\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-ax^2} = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$)

・エネルギーの極小

$$\frac{dE_0}{dB} = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2}{m} - \frac{m\omega^2}{B^2}\right) = 0$$

$$B = \frac{m\omega}{\hbar}$$

・そのときのエネルギー

$$E_0 = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2}{m}\cdot\frac{m\omega}{\hbar} + m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\right)$$

$$= \frac{1}{4}(\hbar\omega + \hbar\omega)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega$$

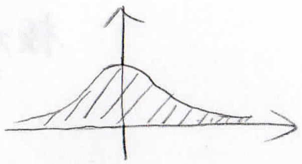
☆ 第一励起状態

・直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_0\,dx = AC\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}(B+F)x^2}dx + AD\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\frac{1}{2}(B+F)x^2}dx$$

(奇関数
$f(-x)=-f(x)$
$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\,dx=0$)

$$= AC\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}(B+F)x^2}$$



0にならない

$$=0$$

$A\neq0$ より $C=0$

$$\psi_1 = Dx\,e^{-\frac{1}{2}Fx^2}$$

・規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_1\,dx = D^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-Fx^2}dx$$

$$= \frac{D^2}{2F}\sqrt{\frac{\pi}{F}}$$

$$=1$$

$$D^2 = 2F\sqrt{\frac{F}{\pi}}$$

・エネルギー

$$E_1 = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\hat{H}\psi_1\,dx$$

$$= D^2\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-Fx^2}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(-3Fx+F^2x^3)+\frac{m\omega^2}{2}\right\}dx$$

$$= 2F\sqrt{\frac{F}{\pi}}\left\{\frac{3\hbar^2F}{2m}\cdot\frac{1}{2F}\sqrt{\frac{\pi}{F}}+\left(-\frac{\hbar^2F^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\right)\frac{3}{4F^2}\sqrt{\frac{\pi}{F}}\right\}$$

$$E_1 = \frac{3\hbar^2F}{2m}-\frac{3\hbar^2F}{4m}+\frac{3m\omega^2}{4F}$$

$$= \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2F}{m}+\frac{m\omega^2}{F}\right)$$

(ガウス積分
$\int_{-\infty}^{\infty}x^4e^{-ax^2} = \frac{3}{4a^2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$)

・エネルギーの極小

$$\frac{dE_1}{dF} = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2}{m}-\frac{m\omega^2}{F^2}\right)=0$$

$$F = \frac{m\omega}{\hbar}$$

・そのときのエネルギー

$$E_1 = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2}{m}\cdot\frac{m\omega}{\hbar}+m\omega^2\frac{\hbar^2}{m\omega}\right)$$

$$= \frac{3}{4}(\hbar\omega+\hbar\omega)$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega,\ E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

調和振動子のエネルギー $E_n = (n+\frac{1}{2}\hbar\omega)$ $(n=0,1,2\cdots)$

と矛盾しない答え