数理物理及び演習 III（量子力学）　2004.10.21

7　変分法

1【無限に深い井戸】井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < -a,\, x > a) \\ 0 & (-a < x < a) \end{cases}$$

に閉じ込められた質量 m の粒子の基底状態のエネルギー E_0 を，以下の試行関数を用いて変分法により推定せよ。また，その結果を厳密な値 $E_0 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8a^2m}$ と比較せよ。

(1) $u(x) = a^2 - x^2$

(2) $u(x) = a^\lambda - |x|^\lambda \quad (\lambda > 0)$

2【ヘリウム原子】ヘリウム原子は2つの電子をもつ。そのハミルトニアンを

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{2\alpha\hbar c}{r_1} - \frac{2\alpha\hbar c}{r_2} + \frac{\alpha\hbar c}{r_{12}}$$

とする（添え字1，2はそれぞれの電子，r_{12} はその間の距離）。Z を変分パラメーターとした試行関数

$$u(r_1, r_2) = R_{10}(r_1)R_{10}(r_2), \quad R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

を用いて，基底状態のエネルギーを以下の手順に従って変分法により推定せよ。ただし，$R_{10}(r)$ は原子番号 Z の1電子原子の基底状態の規格化された動径波動関数であり，そのエネルギー固有値は $E_1 = -\dfrac{Z^2\alpha\hbar c}{2a_0}$ である。

(1) $\dfrac{1}{r_1}, \dfrac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m}, \dfrac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} - \dfrac{2\alpha\hbar c}{r_1}$ の期待値を求めよ。

(2) 期待値 $\langle H \rangle$ を求め，その最小値およびそのときの Z を求めよ。ただし，$\dfrac{\alpha\hbar c}{r_{12}}$ の期待値が $\dfrac{5Z\alpha\hbar c}{8a_0}$ であることを用いてよい。

(3) ヘリウム原子の基底状態のエネルギーの実験値は約 -78.8 eV である。これを (3) の結果と比較せよ。ただし，以下の数値を用いてよい。

$$\alpha \approx \frac{1}{137}, \quad \hbar c \approx 197\,\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}, \quad a_0 \approx 0.53\,\text{Å}$$