(無限井戸型ポテンシャル系の基底状態における位置運動量不確定性関係)
filename=potential-infinite-xp-uncertainty-grdstate-QA20150410A.tex

幅が位置座標 $x=0$ から $x=a(>0)$ の無限井戸型ポテンシャルの中の量子的粒子の基底状態の波動関数が $\psi_1(x)\equiv\sqrt{2/a}\cdot\sin(\pi x/a)$ と与えられている。ディラック定数を $\hbar$ として次の問に答えよ。

a. この状態における位置座標の不確定性 Δx を計算せよ。

b. この状態における運動量の不確定性 Δp を計算せよ。

c. この状態における位置と運動量の不確定性関係の値を計算し、$\hbar/2$ と比較せよ。

(解答例)

a. 位置座標の不確定性 Δx は $\Delta x\equiv\sqrt{<\hat{x}^2>-<\hat{x}>^2}$ と定義される。期待値 $<\hat{x}>$ と $<\hat{x}^2>$ をまず計算する。位置座標演算子 $\hat{x}=x$ であり、位置座標演算子 $\hat{x}$ の期待値の定義より

$$\begin{aligned} <\hat{x}>_1 &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\hat{x}\cdot\psi_1(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\cdot\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{1}{a}\int_0^a x\left[1-\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]dx \end{aligned} \tag{1}$$

となる。ここで、右辺最後の項の第2の積分（I_1 とおく）の計算をする。そのため、任意の関数 $f=f(x),g=g(x)$ に対する部分積分の公式を使う。

$$(fg)' = f'g+fg'\to\int f'gdx=fg-\int fg'dx. \tag{2}$$

ここで、式 (6) において、$f\equiv\cos(2\pi x/a),\ g\equiv x$ と置くと

$$\begin{aligned} I_1 &\equiv \int_0^a x\cdot\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx=\int_0^a\left(\frac{a}{2\pi}\right)\{\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\}'\cdot x\ dx \\ &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)\left[\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot x\right]_{x=0}^{x=a}-\left(\frac{a}{2\pi}\right)\int_0^a\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx \\ &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2\left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a}=0 \end{aligned} \tag{3}$$

となる。この I_1 の値を式 (1) に代入すると

$$<\hat{x}>_1 = \frac{a}{2} \tag{4}$$

が得られる。続いて

$$\begin{aligned} <\hat{x}^2>_1 &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\hat{x}^2\cdot\psi_1(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\cdot\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{1}{a}\int_0^a x^2\left[1-\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]dx \end{aligned} \tag{5}$$

となる。ここで、右辺最後の項の第 2 の積分（I_2 とおく）の計算をする。そのため、任意の関数 $f=f(x), g=g(x)$ に対する部分積分の公式を使う。

$$(fg)' \;=\; f'g+fg' \rightarrow \int f'gdx = fg-\int fg'dx. \tag{6}$$

ここで、式 (6) において、$f \equiv \cos(2\pi x/a),\; g \equiv x^2$ と置くと

$$\begin{aligned} I_2 &\equiv \int_0^a x^2\cdot\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx = \int_0^a \left(\frac{a}{2\pi}\right)\{\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\}'\cdot x^2\;dx \\ &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)\left[\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot x^2\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{2\pi}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot 2xdx \\ &= -\frac{a}{\pi}\int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot xdx = \frac{a^2}{2\pi^2}\int_0^a\{\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\}'\cdot xdx \end{aligned} \tag{7}$$

再び，式 (6) において、$f \equiv \cos(2\pi x/a),\; g \equiv x$ と置くと

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{a^2}{2\pi^2}\left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot x\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{a^2}{2\pi^2}\int_0^a \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{a^3}{2\pi^2} - \frac{a^3}{4\pi^3}\left[\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = \frac{a^3}{2\pi^2}. \end{aligned} \tag{8}$$

この結果を式 (5) に代入すると

$$<\hat{x}^2>_1 \;=\; \frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2\pi^2} \tag{9}$$

が得られる。従って、位置座標の不確定性 Δx は次のようになる。

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2\pi^2}-\left(\frac{a}{2}\right)^2 \\ &= \left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}\right)a^2 \\ \rightarrow \Delta x &= \sqrt{\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}\right)}\cdot a. \end{aligned} \tag{10}$$

b. 運動量演算子 $\hat{p}=(\hbar/\mathrm{i})d/dx$ であり、演算子の期待値の定義より

$$\begin{aligned} <\hat{p}>_1 &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\hat{p}\cdot\psi_1(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{d}{dx}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{2\pi\hbar}{\mathrm{i}a^2}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx = \frac{2\pi\hbar}{\mathrm{i}a^2}\int_0^a\frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{\pi\hbar}{\mathrm{i}a^2}\frac{a}{2\pi}\left[-\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = 0 \\ \rightarrow <\hat{p}>_1 &= 0 \end{aligned} \tag{11}$$

と求まる。同様に

$$<\hat{p}^2>_1 \;\equiv\; \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\hat{p}^2\cdot\psi_1(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2\frac{d^2}{dx^2}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx = \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \left[1-\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]dx \\
&= \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^3}[x]_{x=0}^{x=a} - \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx \\
\rightarrow < \hat{p}^2 >_1 &= \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^2}. \qquad (12)
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
(\Delta p)^2 &\equiv < \hat{p}^2 >_1 - [< \hat{p} >_1]^2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^2} \\
\rightarrow \Delta p &= \frac{\sqrt{2}\pi\hbar}{a}. \qquad (13)
\end{aligned}
$$

c. 以上の結果より

$$
\begin{aligned}
\Delta x \Delta p &= \sqrt{\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}\right)\times 2\pi^2\hbar^2} = \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{6}-1\right)}\cdot\hbar \\
&= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\left(\frac{2\pi^2}{3}-4\right)} \\
\rightarrow \Delta x \Delta p &= \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{6}-1\right)}\cdot\hbar > \frac{\hbar}{2} \qquad (14)
\end{aligned}
$$