(一 次 元 無 限 大 ポ テ ン シ ャ ル 箱 に お け る 期 待 値 と 不 確 定 性 関 係 : potential-infinite-4qa140506.tex)

次のような一次元無限大ポテンシャル箱（井戸）

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (0 \geq x, x \geq a) \end{cases} \tag{1}$$

の中の量子的粒子（質量 m）の基底状態の波動関数が次のように与えられている.

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \tag{2}$$

以下の問に答えよ。ただし、プランク定数 h, ディラック定数 $\hbar \equiv h/2\pi$ とする.

1. 位置演算子 $\hat{x}$ とその 2 乗の期待値を計算せよ。
2. 運動量演算子 $\hat{p}_x$ とその 2 乗の期待値を計算せよ。
3. 位置と運動量の間の不確定性関係を計算せよ。
4. ハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値を計算せよ。

（解答例）

1. 波動関数 $\psi_n(x)$ は規格化されているので、位置演算子 $\hat{x}$ の基底状態における期待値は、部分積分の公式も用いて、次のように計算される。

$$\begin{aligned} <\hat{x}> &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x) \cdot x \cdot \psi_1(x) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \ \sin^2(\frac{\pi x}{a}) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \ \frac{1-\cos(\frac{2\pi x}{a})}{2} dx \\ &= \frac{2}{a} \left[\frac{x^2}{4} - \frac{x}{2}\frac{a}{2\pi}\sin(\frac{2\pi x}{a}) \right]_{x=0}^{x=a} \\ &\quad + \frac{a}{4\pi} \int_0^a \sin(\frac{2\pi x}{a}) dx \\ &= \frac{2}{a} \left(\frac{a^2}{4} - \left[\frac{a^2}{8\pi^2} \cos(\frac{2\pi x}{a}) \right]_{x=0}^{x=a} \right) \\ \to <\hat{x}> &= \frac{a}{2}. \end{aligned} \tag{3}$$

確率密度 $\psi_1^*(x)\psi_1(x)$ の形が $x = a/2$ を中心に左右対称になっているので、得られた結果は予想どおりである。

同様にして、位置演算子 $\hat{x}$ の 2 乗の期待値も次のようになる。

$$\begin{aligned} <\hat{x}^2> &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x) \cdot x^2 \cdot \psi_1(x) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \cdot \sin^2(\frac{\pi x}{a}) dx \\ \to <\hat{x}^2> &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2}. \end{aligned} \tag{4}$$

2. 同様に

$$\begin{aligned} <\hat{p}_x> &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x) \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \cdot \psi_1(x) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin(\frac{\pi x}{a}) \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\pi}{a} \cos(\frac{\pi x}{a}) dx \\ &= \frac{\pi\hbar}{a^2 i} \int_0^a \sin(\frac{2\pi x}{a}) dx \\ \to <\hat{p}_x> &= 0. \end{aligned} \tag{5}$$

運動量演算子の期待値がゼロになる物理的な理由を調べてみる。基底状態の波動関数はオイラー公式を用いて

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{\pi x}{a}) \\ &= \frac{1}{i\sqrt{2a}} (\mathrm{e}^{i\pi x/a} - \mathrm{e}^{-i\pi x/a}) \end{aligned} \tag{6}$$

と書き直される．時間に依存する因子も考慮すれば、進行波と後退波が同じ重みで重ねあわされているので、運動量は平均するとゼロになるのである。同様に、運動量演算子 $\hat{p}_x$ の 2 乗の期待値は

$$\begin{aligned} <\hat{p}_x^2> &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\cdot\psi_1(x)dx \\ &= \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2\int_0^a \psi_1^*(x)\psi_1(x) \\ \rightarrow <\hat{p}_x^2> &= \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2. \end{aligned} \tag{7}$$

3. ある演算子 $\hat{A}$ の不確定性 ΔA を次式で定義する。

$$(\Delta A)^2 \equiv <\hat{A}^2> -(<\hat{A}>)^2. \tag{8}$$

位置の不確定性は式 (3),(4) を用いて

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= <\hat{x}^2> -(<\hat{x}>)^2 \\ &= \left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}\right)a^2 \\ \rightarrow \Delta x &= \sqrt{\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}\right)}\cdot a \end{aligned} \tag{9}$$

となる。同様に、運動量の不確定性は式 (5),(7) を用いて

$$\begin{aligned} (\Delta p_x)^2 &\equiv <\hat{p}_x^2> -(<\hat{p}_x>)^2 \\ &= \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2 \\ \rightarrow \Delta p_x &= \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right) \end{aligned} \tag{10}$$

となる。従って、位置と運動量の不確定性関係は

$$\begin{aligned} \Delta x\cdot\Delta p_x &= \pi\sqrt{\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2}}\hbar \\ &\approx \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \tag{11}$$

となる。

(コメント１：無限量子井戸における結果の意味)　波動関数の規格性は一種の面積の保存と解釈でき，運動量演算子は座標の微分係数（＝波動関数の傾き）に比例する．したがって，位置と運動量の間の不確定性関係は井戸の幅 a が減少すると，波動関数の傾きが大きくならざるをえない，すなわち運動量が大きくなることと解釈してもよいであろう．

(コメント２：一般の場合の不確定性関係)　正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$ を要請すると，一般に $\Delta x\Delta p_x \geq \hbar/2$ であることが証明できる．

4. 無限量子井戸の内部において、ハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{12}$$

である. 基底状態における、その期待値は

$$\begin{aligned} <\hat{H}> &\equiv \int_0^a \psi_1^*(x)\cdot\hat{H}\cdot\psi_1(x)dx \\ &= \frac{2}{a}\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2\int_0^a \sin^2(\frac{\pi x}{a})dx \\ \rightarrow <\hat{H}> &= \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2. \end{aligned} \tag{13}$$

となる。しかし、シュレーディンガー方程式はハミルトニアンの固有値問題であること、すなわち, $\hat{H}\psi_1(x) = E_{n=1}\psi_1(x)$ であることを用いれば、ハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値は固有値そのものであることがわかる。