(無限井戸型ポテンシャル系の励起状態における座標期待値)
filename=potential-infinite-expectationvalue-x-3rdstate-QA20150301A.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第2励起状態の波動関数が $\psi_3(x) \equiv \sqrt{2/a} \cdot \sin(3\pi x/a)$ と与えられている。次の問に答えよ。

a. この波動関数 $\psi_3(x)$ は規格化されているかどうか、規格化積分を計算して確認せよ。

b. この状態における位置座標演算子 $\hat{x}$ の期待値を計算せよ。

(解答例)

a. 題意より

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi_3^*(x)\psi_3(x)dx &= \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right)dx = \frac{1}{a}\int_0^a \left[1-\cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\right]dx \\ &= \frac{1}{a}\left[x\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{1}{a}\left[\left(\frac{a}{6\pi}\right)\sin\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} \\ &= 1 \end{aligned} \tag{1}$$

となり、規格化されている。

b. （通常、採用されている座標表示では）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

$$\begin{aligned} <\hat{x}>_3 &\equiv \int_0^a \psi_3^*(x)\cdot\hat{x}\cdot\psi_3(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\cdot\sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right)dx \\ &= \frac{1}{a}\int_0^a x\left[1-\cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\right]dx \end{aligned} \tag{2}$$

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。

$$(fg)' = f'g + fg' \rightarrow \int f'g dx = fg - \int fg' dx. \tag{3}$$

ここで、式 (3) において、$f \equiv \cos(6\pi x/a),\ g \equiv x$ と置くと

$$\begin{aligned} I_1 &\equiv \int_0^a x\cdot\cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)dx = \int_0^a \left(\frac{a}{6\pi}\right)\{\sin\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\}'\cdot x\ dx \\ &= \left(\frac{a}{6\pi}\right)\left[\sin\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\cdot x\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{6\pi}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{6\pi x}{a}\right)dx \\ &= \left(\frac{a}{6\pi}\right)^2\left[\cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = 0 \end{aligned} \tag{4}$$

となる。この I_1 の値を式 (2) に代入すると

$$<\hat{x}>_3 = \frac{a}{2} \tag{5}$$

が得られる。