

(無限井戸型ポテンシャル系の第1励起状態における位置運動量不確定性関係)

filename=potential-infinite-xp-uncertainty-2ndstate-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1励起状態の波動関数が  $\psi_2(x) \equiv \sqrt{2/a} \cdot \sin(2\pi x/a)$  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。

- この状態における位置座標の不確定性  $\Delta x$  を計算せよ。
- この状態における運動量の不確定性  $\Delta p$  を計算せよ。
- 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  $\Delta x$  は  $\Delta x \equiv \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$  と定義される。期待値  $\langle \hat{x} \rangle$  と  $\langle \hat{x}^2 \rangle$  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

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle_2 &\equiv \int_0^a \psi_2^*(x) \cdot \hat{x} \cdot \psi_2(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \cdot \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right] dx\end{aligned}\quad (1)$$

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。

$$(fg)' = f'g + fg' \rightarrow \int f'g dx = fg - \int fg' dx.\quad (2)$$

ここで、式(6)において、 $f \equiv \cos(4\pi x/a)$ ,  $g \equiv x$  と置くと

$$\begin{aligned}I_1 &\equiv \int_0^a x \cdot \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx = \int_0^a \left(\frac{a}{4\pi}\right) \left\{\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right\}' \cdot x dx \\ &= \left(\frac{a}{4\pi}\right) \left[\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \cdot x\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{4\pi}\right) \int_0^a \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \\ &= \left(\frac{a}{4\pi}\right)^2 \left[\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = 0\end{aligned}\quad (3)$$

となる。この  $I_1$  の値を式(1)に代入すると

$$\langle \hat{x} \rangle_2 = \frac{a}{2}\quad (4)$$

が得られる。続いて

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^2 \rangle_2 &\equiv \int_0^a \psi_2^*(x) \cdot \hat{x}^2 \cdot \psi_2(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \cdot \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \left[1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right] dx\end{aligned}\quad (5)$$

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。

$$(fg)' = f'g + fg' \rightarrow \int f'g dx = fg - \int fg' dx. \quad (6)$$

ここで、式(6)において、 $f \equiv \cos(4\pi x/a), g \equiv x^2$  と置くと

$$\begin{aligned} I_2 &\equiv \int_0^a x^2 \cdot \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx = \int_0^a \left(\frac{a}{4\pi}\right) \left\{\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right\}' \cdot x^2 dx \\ &= \left(\frac{a}{4\pi}\right) \left[\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \cdot x^2\right]_{x=0}^{x=a} - \left(\frac{a}{4\pi}\right) \int_0^a \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \cdot 2x dx \\ &= -\frac{a}{2\pi} \int_0^a \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \cdot x dx = \frac{a^2}{8\pi^2} \int_0^a \left\{\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right\}' \cdot x dx \end{aligned} \quad (7)$$

再び、式(6)において、 $f \equiv \cos(4\pi x/a), g \equiv x$  と置くと

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{a^2}{8\pi^2} \left[\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \cdot x\right]_{x=0}^{x=a} - \frac{a^2}{8\pi^2} \int_0^a \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{a^3}{8\pi^2} - \frac{a^3}{32\pi^3} \left[\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = \frac{a^3}{8\pi^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

この結果を式(5)に代入すると

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_2 = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{8\pi^2} \quad (9)$$

が得られる。従って、位置座標の不確定性  $\Delta x$  は次のようになる。

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{8\pi^2} - \left(\frac{a}{2}\right)^2 \\ &= \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8\pi^2}\right) a^2 \\ \rightarrow \Delta x &= \sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8\pi^2}\right)} \cdot a. \end{aligned} \quad (10)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle_2 &\equiv \int_0^a \psi_2^*(x) \cdot \hat{p} \cdot \psi_2(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{4\pi\hbar}{ia^2} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{4\pi\hbar}{ia^2} \int_0^a \frac{1}{2} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{2\pi\hbar}{ia^2} \frac{a}{4\pi} \left[-\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right]_{x=0}^{x=a} = 0 \\ \rightarrow \langle \hat{p} \rangle_2 &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

と求まる。同様に

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_2 \equiv \int_0^a \psi_2^*(x) \cdot \hat{p}^2 \cdot \psi_2(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{8\pi^2\hbar^2}{a^3} \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^3} \int_0^a \left[1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right] dx \\
&= \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^3} [x]_{x=0}^{x=a} - \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^3} \int_0^a \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \\
\rightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle_2 &= \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^2}. \tag{12}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
(\Delta p)^2 &\equiv \langle \hat{p}^2 \rangle_2 - [\langle \hat{p} \rangle_2]^2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^2} \\
\rightarrow \Delta p &= \frac{2\pi\hbar}{a}. \tag{13}
\end{aligned}$$

c. 以上の結果より

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta p &= \sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8\pi^2}\right) \times 4\pi^2\hbar^2} = \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{3} - \frac{1}{2}\right)} \cdot \hbar \\
&= \frac{\hbar}{2} \sqrt{\left(\frac{4\pi^2}{3} - 2\right)} \\
\rightarrow \Delta x \Delta p &= \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{3} - \frac{1}{2}\right)} \cdot \hbar > \frac{\hbar}{2} \tag{14}
\end{aligned}$$