波動関数に関する定積分

大きさ無限大のポテンシャルの障壁で長さでLの領域に閉じ込められた電子の一次元の運動に対する波動関数は、講義で説明したように

$$\varphi_m = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{m\pi}{L} x \quad (m = 1,2,3,\cdots)$$

であらわされる。

（1）正規化

まず、正規化されていることを調べる

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x \right) dx$$
$$= \frac{1}{L} \int_0^L \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x \right) dx$$

ただし、ここで三角関数の公式

$$\sin^2 A = \frac{1}{2} \left(1 - \cos(2A) \right)$$

をもちいた。計算をすすめると

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x \right) dx = \frac{1}{L} \left[x - \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L = \frac{1}{L} (L - 0) = 1$$

（2）直交性

直交性を調べるために$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle$を計算する。ただし、$m \neq n$とする。

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{m\pi}{L} x \right) \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \left(\sin \frac{m\pi}{L} x \right) \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right) dx$$

三角関数の公式

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} \left(\cos(A - B) - \cos(A + B) \right)$$

をもちいると

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \left(\sin \frac{m\pi}{L} x \right) \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\cos \frac{(m-n)\pi}{L} x - \cos \frac{(m+n)\pi}{L} \right) dx$$
$$= \frac{1}{L} \left[\frac{L}{(m-n)} \sin \frac{(m-n)\pi}{L} x - \frac{L}{(m+n)} \sin \frac{(m+n)\pi}{L} x \right]_0^L = 0$$

（3）座標の平均値

$$\langle x \rangle_n = \langle \varphi_n | x | \varphi_n \rangle = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) x \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L x \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx = \frac{1}{L} \int_0^L x \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x dx - \frac{1}{L} \int_0^L x \cos \frac{2n\pi}{L} x dx$$

第一項は

$$\frac{1}{L} \int_0^L x dx = \frac{1}{L} \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^L = \frac{1}{L} \frac{L^2}{2} = \frac{L}{2}$$

第二項は部分積分をおこなうと

$$\int_0^L x \cos \frac{2n\pi}{L} x dx = \left[x \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L - \int_0^L \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x dx$$

$$= -\frac{L}{2n\pi} \int_0^L \sin \frac{2n\pi}{L} x dx = \left(\frac{L}{2n\pi} \right)^2 \left[\cos \frac{2n\pi}{L} \right]_0^L = \left(\frac{L}{2n\pi} \right)^2 (1-1) = 0$$

従って

$$\langle x \rangle_n = \frac{2}{L} \int_0^L x \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx = \frac{L}{2}$$

（4）座標の自乗平均値

$$\langle x^2 \rangle_n = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) x^2 \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) dx = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx$$

$$= \frac{1}{L} \int_0^L x^2 \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x^2 dx - \frac{1}{L} \int_0^L x^2 \cos \frac{2n\pi}{L} x dx$$

第一項は

$$\frac{1}{L} \int_0^L x^2 dx = \frac{1}{L} \left[\frac{x^3}{3} \right]_0^L = \frac{1}{L} \frac{L^3}{3} = \frac{L^2}{3}$$

第二項は部分積分をおこなうと

$$\frac{1}{L} \int_0^L x^2 \cos \frac{2n\pi}{L} x dx = \frac{1}{L} \left[x^2 \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L - \frac{1}{L} \int_0^L 2x \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x dx$$

$$= -\frac{1}{n\pi} \int_0^L x \sin \frac{2n\pi}{L} x dx = -\frac{1}{n\pi} \left(\left[-x \frac{L}{2n\pi} \cos \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L + \int_0^L \frac{L}{2n\pi} \cos \frac{2n\pi}{L} x dx \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{L}{n\pi} \right)^2 - \frac{L}{2n^2\pi^2} \int_0^L \cos \frac{2n\pi}{L} x dx = \frac{1}{2} \left(\frac{L}{n\pi} \right)^2 - \frac{L}{2n^2\pi^2} \left[\frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L = \frac{L^2}{2(n\pi)^2}$$

従って

$$\left\langle x^2\right\rangle_n = \frac{1}{L}\int_0^L x^2\cos\frac{2n\pi}{L}xdx = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2(n\pi)^2} = \frac{L^2}{3}\left(1-\frac{3}{2(n\pi)^2}\right)$$

（5）座標の標準偏差

$$(\Delta x)^2 = \left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2 = \frac{L^2}{3}\left(1-\frac{3}{2(n\pi)^2}\right) - \frac{L^2}{4} = \frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{2(n\pi)^2} = \frac{L^2}{12}\left(1-\frac{6}{(n\pi)^2}\right)$$

より

$$\Delta x = \sqrt{\frac{L^2}{12}\left(1-\frac{6}{(n\pi)^2}\right)} = \frac{L}{\sqrt{12}}\sqrt{1-\frac{6}{(n\pi)^2}}$$

（6）運動量の平均値

$$\left\langle p_x\right\rangle_n = \left\langle \varphi_n\middle| p_x\middle|\varphi_n\right\rangle = \int_0^L\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)dx = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\left(\frac{n\pi}{L}\cos\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{2}{L}\frac{n\pi}{L}\int_0^L\sin\frac{2n\pi}{L}xdx = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{L}\frac{2n\pi}{L}\left[\frac{L}{2n\pi}\cos\frac{2n\pi}{L}x\right]_0^L = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{L}(1-1) = 0$$

ただし三角関数の公式 $\sin 2A = 2\sin A\cos A$ をもちいた。

（7）運動量の自乗平均値

$$\left\langle p_x{}^2\right\rangle_n = \int_0^L\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\right)dx = -\hbar^2\frac{2}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\right)dx$$

$$= -\hbar^2\frac{2}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{n\pi}{L}\cos\frac{n\pi}{L}x\right)dx = -\hbar^2\frac{2}{L}\frac{n\pi}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\left(-\frac{n\pi}{L}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \hbar^2\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\frac{2}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)^2 dx = \hbar^2\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

ここでは、規格化で述べたように

$$\frac{2}{L}\int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)^2 dx = \frac{L}{2}$$

であることを利用した。

（8）運動量の標準偏差

$$\Delta p_x = \sqrt{\left\langle p_x{}^2\right\rangle - \left\langle p_x\right\rangle^2} = \sqrt{\left\langle p_x{}^2\right\rangle} = \hbar\frac{\pi}{L}n$$