不確定性関係から求めた箱の中の電子の運動エネルギーと Schrödinger 方程式から求めたそれとの差の問題 --2017.01.28--

不確定性関係を$\Delta p \cdot \Delta x \geq \dfrac{\hbar}{2}$として，無限大ポテンシャルの壁に閉じ込められた電子の運動エネルギーを求める

1 次元でも本質的には変わらないので，それで議論する．

質量 m，速度 u で運動する電子の運動エネルギー（T）は$(1/2)mu^2$．運動量（$p = mu$）で書き直し，$(1/2m)p^2$ となる．“運動量の曖昧さ”（Δp）を用いて運動エネルギーを求める．

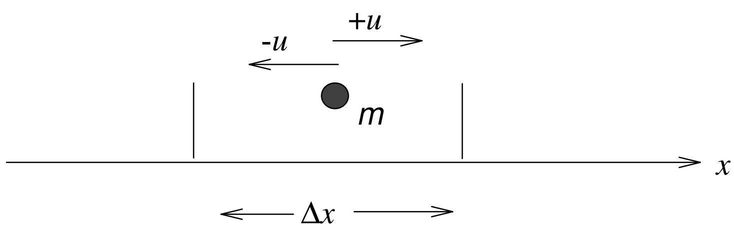

図 1．Δx の範囲を運動する質量 m の粒子.

運動の範囲をΔx，運動量は曖昧さΔp を含む（正しい値を p とすると $p \pm\Delta p$ の範囲にあるということ）ものとする．p の 2 乗の平均値（$\overline{p^2}$）は，曖昧さの含む運動量を平均すると求まる．粒子は右向きの運動を左向きの運動が同じ確率で起こるので，運動量を平均すると 0 となる（$\overline{p} = 0$）．

$$(\Delta p)^2 = (p - \overline{p})^2_{aver} = \overline{p^2}$$

この関係を用いると，エネルギーの平均（$\overline{E}$）は、

$$\overline{E} = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2$$

これに不確定性原理の関係式を導入する．

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$\overline{E} \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

次に Schrödinger 方程式で箱の中の電子のエネルギーを求めてみる．

これは,

$$E\psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

を解けばよい．箱の大きさを Δx とすれば,

$$E(n_x) = \left(n_x^2\right)\frac{h^2}{8m\Delta x^2} \qquad 2$$

1 式と 2 式を比べる．n_x=1 とすると 1 式は $1/4\pi^2$ だけ小さくなる。この差はどこから来るのか？

最近，小澤さんという人が，今までの不確定性関係式は不完全であり，新たに（小澤の不等式）というものを提出した[1]．その不等式は、

$$\Delta x \cdot \Delta p + \Delta x' \cdot \Delta p + \Delta x \cdot \Delta p' \geq \frac{\hbar}{2} \qquad 3$$

$\Delta x'$ および $\Delta p'$ はもともと持っていた粒子の量子揺らぎ．3 式左式の後ろの 2 項が，入っていないため 1 式は小さくでたのだろうか？もしそうなら, 1 と 2 式の差から量子揺らぎが求めることができます.

1) Ozawa, Masanao (2003), “Universally valid reformulation of the Heisenberg uncertainty principle on noise and disturbance in measurement”, *Physical Review A* **67** (4).