箱型ポテンシャルの波動関数, 確率密度の運動量表示について

箱型ポテンシャルの位置表示させた波動関数は $\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right)$ と書ける。
適切な Fourier 変換を行うことで波動関数を運動量表示にする。積分を実行すると、

$$
\begin{aligned}
\psi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\int_0^a \frac{\exp\left(i\frac{n\pi x}{a}\right)-\exp\left(-i\frac{n\pi x}{a}\right)}{2i}e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx \\
&= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar a}}\int_0^a \left\{\exp\left[i\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)x\right]-\exp\left[-i\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)x\right]\right\}dx \\
&= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar a}}\left[\frac{\exp\left[i\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)x\right]}{i\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)}+\frac{\exp\left[-i\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)x\right]}{i\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)}\right]_0^a \\
&= \frac{\sqrt{a}}{-2\sqrt{\pi\hbar}}\left(\frac{\exp\left(i\left(n\pi-\frac{p}{\hbar}a\right)\right)-1}{n\pi-\frac{p}{\hbar}a}+\frac{\exp\left(-i\left(n\pi+\frac{p}{\hbar}a\right)\right)-1}{n\pi+\frac{p}{\hbar}a}\right) \\
&= \frac{-\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi\hbar}}\left((-1)^n\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}a\right)-1\right)\left(\frac{1}{n\pi-\frac{p}{\hbar}a}+\frac{1}{n\pi+\frac{p}{\hbar}a}\right) \\
&= \frac{-n\sqrt{a}\pi}{\hbar}\frac{\left((-1)^n\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}a\right)-1\right)}{(n\pi)^2-\left(\frac{p}{\hbar}a\right)^2}。
\end{aligned}
$$

係数が $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ の Fourier 変換はユリタニ変換であり、内積が保存する (プランシュレルの定理) ので、規格化定数は変えなくてよい。運動量表示させた確率密度は、

$$
|\psi_n(p)|^2=\frac{n^2a\pi}{\hbar\left((n\pi)^2-\left(\frac{p}{\hbar}a\right)^2\right)^2}\left|(-1)^n\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}a\right)-1\right|^2=\frac{n^2a\pi}{\hbar\left((n\pi)^2-\left(\frac{p}{\hbar}a\right)^2\right)^2}\left(2-(-1)^n\cos\left(\frac{pa}{\hbar}\right)\right)
$$

n が奇数のとき、$|\psi_n(p)|^2=\frac{4n^2a\pi}{\hbar\left((n\pi)^2-\left(\frac{p}{\hbar}a\right)^2\right)^2}\cos^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)=\frac{n^2a\pi}{4\hbar\left(\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2-\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)^2\right)^2}\cos^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)$

n が偶数のとき、$|\psi_n(p)|^2=\frac{4n^2a\pi}{\hbar\left((n\pi)^2-\left(\frac{p}{\hbar}a\right)^2\right)^2}\sin^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)=\frac{n^2a\pi}{4\hbar\left(\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2-\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)^2\right)^2}\sin^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)$

$|\psi_n(p)|^2$ は n の偶奇に関わらず $p=\frac{n\pi\hbar}{a}$ で極大値を取り、その値は

$$
\lim_{x\to\frac{n\pi}{2}}\frac{\cos x}{(\frac{n\pi}{2})^2-x^2}=\lim_{x\to\frac{n\pi}{2}}\frac{\cos x}{(\frac{n\pi}{2}-x)(\frac{n\pi}{2}+x)}=\lim_{t\to 0}\frac{\sin t}{t}\cdot\frac{1}{n\pi}=\frac{1}{n\pi}
$$

より、$\displaystyle\lim_{p\to\frac{n\pi\hbar}{a}}|\psi_n(p)|^2=\frac{n^2a\pi}{4\hbar\,(n\pi)^2}=\frac{a}{4\hbar\pi}$ であり、n に依存しない。

また、n が奇数の時、$p=\frac{n'\pi\hbar}{a}$（n' は偶数で $n\neq n'$）で $|\psi_n(p)|^2=0$
　　　n が偶数の時、$p=\frac{n'\pi\hbar}{a}$（n' は奇数で $n\neq n'$）で $|\psi_n(p)|^2=0$

このことから、$|\psi_n(p)|^2$ の形を考えると極大値は 1 つでないと考えることができる。
微分係数の計算をすると、$|\psi_n(p')|^2=0$ となる p' から $p'+\dfrac{\hbar\pi}{a}$ までの間に極大が存在することが分かる。p が十分に大きくなると $p\approx p'+\dfrac{\hbar\pi}{a}$ で極大値を取ることが分かる。
また、$|\psi_n(p)|^2$ は偶関数であり、n が奇数の時 $|\psi_n(0)|^2=\dfrac{1}{\hbar n^2\pi}$ 偶数の時 $|\psi_n(0)|^2=0$ となる。