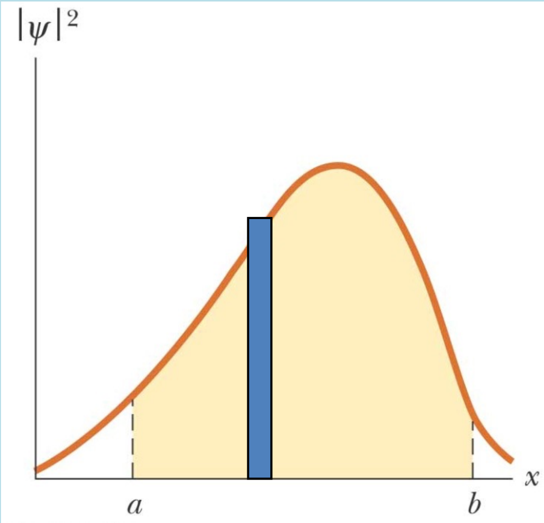
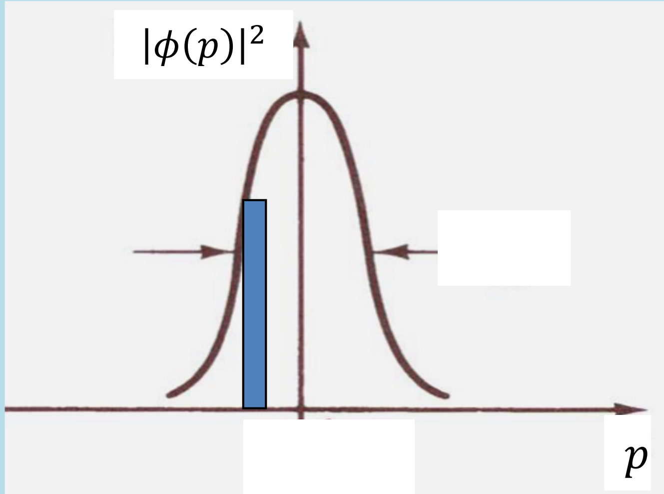
量子力學的機率基本假設

在x與$x + dx$之間發現該粒子的機率，可以寫成：

$$P(x) \cdot dx = |\Psi(x)|^2 \cdot dx = \Psi^*(x) \cdot \Psi(x) \cdot dx$$





動量測量結果在p與$p + dp$之間的機率，可以寫成：

$$|\phi(p)|^2 \cdot dp = \phi^*(p) \cdot \phi(p) \cdot dp$$

以上的假設可以用期望值來表示，就更能推廣到其他物理量！

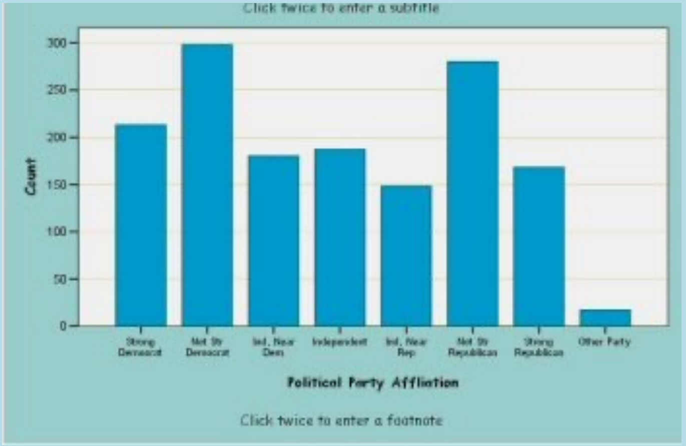
我們也將以此定義來計算不準度，

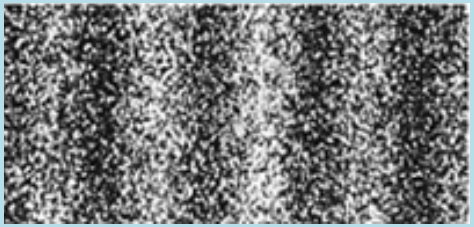
由此可以找到，某物理量測量時，完全沒有不準度的波函數。

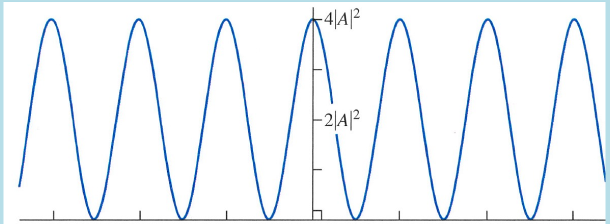
對單一電子的物理量，測量結果不一定確定！

但多次測量後，不確定的結果形成一個可預測的分布！

此分布可以計算出平均值：期望值 Expectation Value。





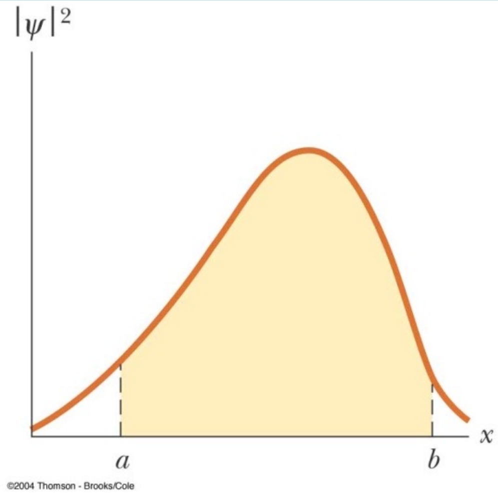


Consider a random variable Q. This variable takes values in the set $\{Q_1, \ldots, Q_n\}$ and does so randomly with respective, nonzero probabilities $\{p_1, \ldots, p_n\}$ adding to one. The *expectation value* $\langle Q \rangle$, or the expected value of Q, is defined to be

$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{n} Q_i P_i \qquad (5.1.1)$$

The expected value can be thought of heuristically as a *long-run mean*: as more and more values of the random variable are collected, the mean of that set approaches the expected value.

$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{n} Q_i P_i$$



位置的期望值 （平均值）即是以機率為權重對位置求和：

位置為連續變數，因此需做積分。

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x \cdot \Psi(x)$$

例如：利用此式可以計算波包函數的位置期望值：

$$\Psi(x,0) = Ce^{ik_0x}e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\cdot x\Psi(x)$$

$$= C^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot xe^{-\frac{x^2}{\alpha}}$$

$$= C^2\int_{0}^{\infty} dx\cdot xe^{-\frac{x^2}{\alpha}} + C^2\int_{-\infty}^{0} dx\cdot xe^{-\frac{x^2}{\alpha}}$$

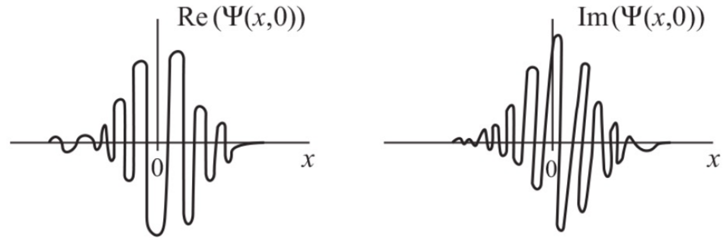
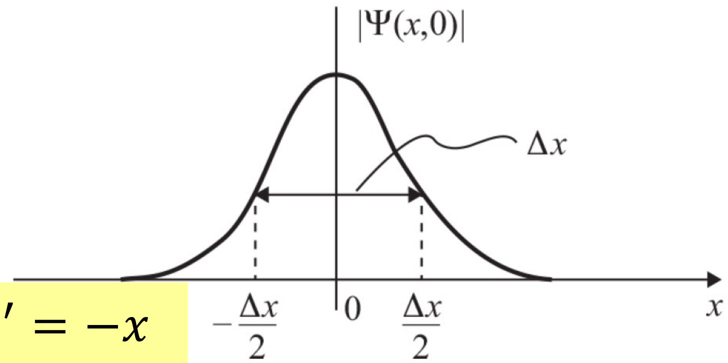


Figure 4.2
The real and imaginary parts of $\Psi(x,0)$.



$$x' = -x$$

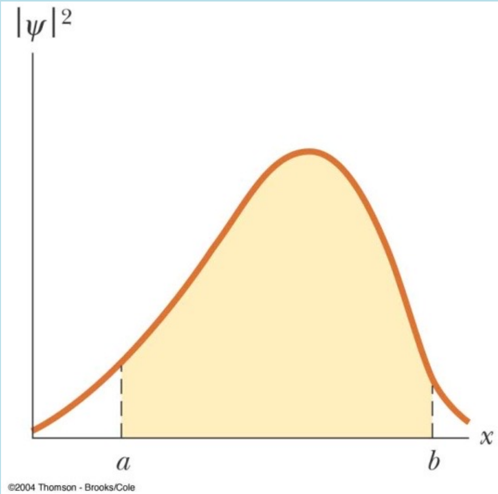
$$= C^2\int_{0}^{\infty} dx\cdot xe^{-\frac{x^2}{\alpha}} - C^2\int_{0}^{\infty} dx'\cdot x'e^{-\frac{x'^2}{\alpha}} = 0$$

$$\langle x\rangle = 0$$

波包位置期望值在原點！

有了位置期望值的計算式：

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x \cdot \Psi(x)$$



任何位置函數、比如位能的期望值就可以用類似方式寫下。

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot f(x) \cdot \Psi(x)$$

我們還可以用此式來計算位置的不確定性Δx！

測量一個物理量$\hat{A}$時的不確定性，由測量結果分布的標準差ΔA來描述 ：

可定義為「測量值與期望值的差」的平方的期望值的開根號。

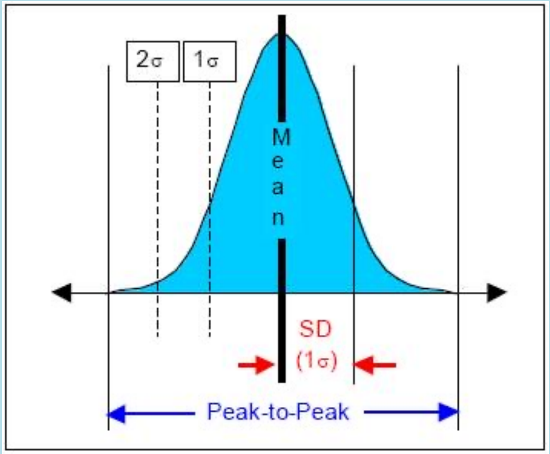
$$(\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

此式可化簡：

$$= \langle x^2 - 2\langle x \rangle x + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

這兩個期望值都可以用波函數計算：

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x^2 \Psi(x) - \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x \Psi(x) \right)^2$$



位置與動量的不確定性$\Delta x, \Delta p$，現在可以精確定義與計算了。

$$(\Delta x)^2 \equiv \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 \qquad (\Delta p)^2 \equiv \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2$$

讓我們試一下計算波包的不確定性$\Delta x, \Delta p$。

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

$$a \equiv \frac{1}{\alpha}$$

$$\Psi(x,0) = Ce^{ik_0x}e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} = Ce^{ik_0x}e^{-\frac{a}{2}x^2}$$

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x^2\Psi(x)$$

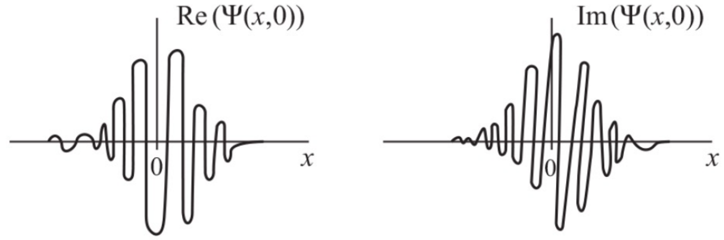
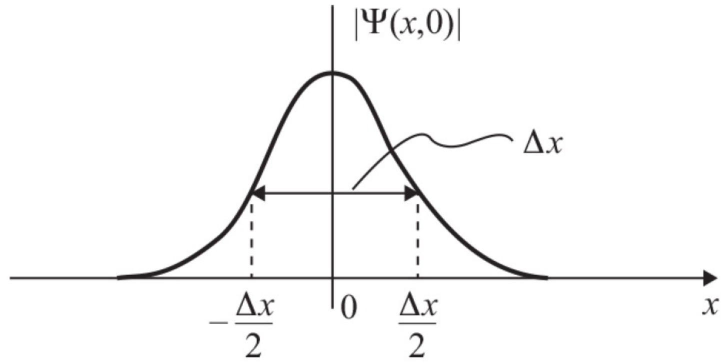


Figure 4.2
The real and imaginary parts of Ψ(x, 0).



首先要將波包函數歸一化：

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x)\,\Psi(x) = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot e^{-ik_0x}e^{ik_0x}e^{-ax^2} = C^2\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$C = \sqrt[4]{\frac{a}{\pi}}$$

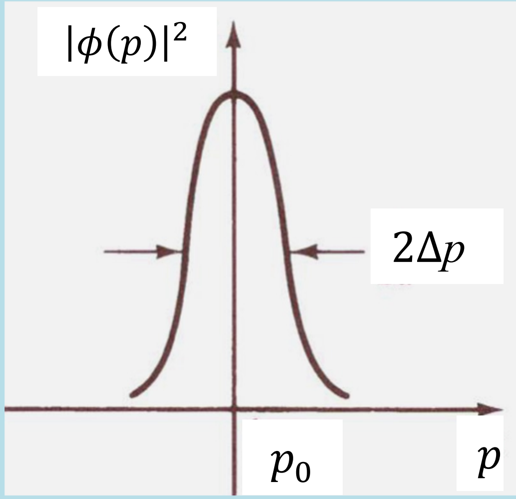
$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x^2\Psi(x) = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^2 e^{-ax^2} = -\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\partial}{\partial a}\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot e^{-ax^2}$$

$$= -\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\partial}{\partial a}\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{a}\frac{1}{a\sqrt{a}} = \frac{1}{2a} = \frac{\alpha}{2}$$

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$$

波包的寬度

如果$|\phi(p)|^2$的分布是高斯分布，寬度Δp即是p測量的不準度：

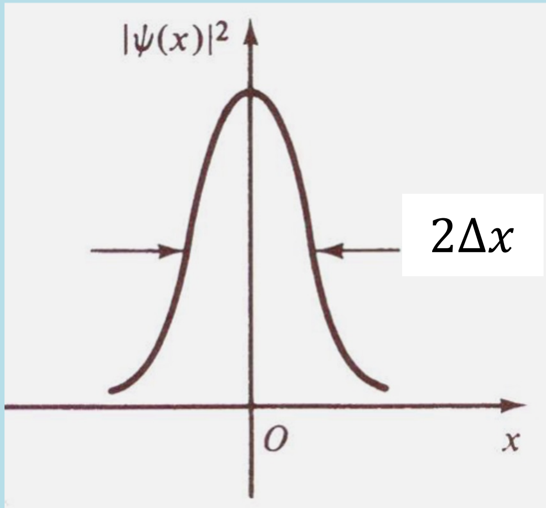


若取極值的$1/e$左右位置為寬度，

$$|\phi(p)|^2 \propto e^{-\frac{\alpha}{\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

$$\Delta p = \hbar/\sqrt{\alpha}$$

波函數強度分布也是一個高斯分布，中心點在原點，寬度Δx即是位置測量的不準度：



$$|\Psi(x,0)|^2 \sim e^{-\frac{x^2}{\alpha}}$$

$$\Delta x = \sqrt{\alpha}$$

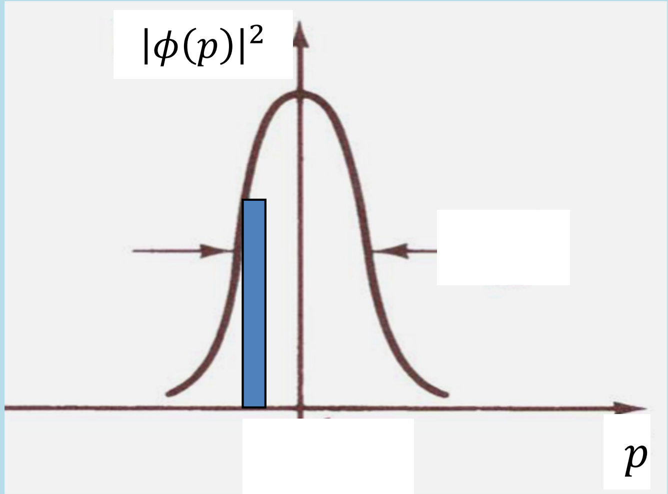
$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$

對於波包，動量與位置的不準度滿足測不準原理！

動量的期望值怎麼算？

動量測量結果在p與$p+dp$之間發現的機率：

$$|\phi(p)|^2 \cdot dp = \phi^*(p) \cdot \phi(p) \cdot dp$$



動量的期望值想當然爾：

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p \cdot |\phi(p)|^2 \cdot dp = \int_{-\infty}^{\infty} dp \cdot \phi^*(p) \cdot p \cdot \phi(p)$$

期待：動量的函數，例如動能的期望值也可同樣方式記算：

$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) \cdot |\phi(p)|^2 \cdot dp = \int_{-\infty}^{\infty} dp \cdot \phi^*(p) \cdot f(p) \cdot \phi(p)$$

$$\Psi(x,0) = \sqrt[4]{\frac{1}{\alpha\pi}}\, e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$$

波包的$\phi(p)$也是高斯分佈，也滿足歸一化條件。因此：

$$\phi(p) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi\hbar^2}}\, e^{-\frac{\alpha p^2}{2\hbar^2}}$$

$$\Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\alpha}}$$

16. Consider the wave function

$$\psi(x) = (\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha x^2/2)$$

Calculate $\langle x^n\rangle$ for $n = 1, 2$. Can you quickly write down the result for $\langle x^{17}\rangle$?

17. Calculate $\phi(p)$ for the wave function in problem 16. Calculate $\langle p^n\rangle$ for $n = 1, 2$.

18. Use the definitions $(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$ and $(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$ with the results of Problems 16 and 17 to show that $\Delta p \Delta x > \hbar/2$.

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

那我可以用位置空間波函數$\Psi(x,0)$來算動量期望值嗎？

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \cdot \phi^*(p)\cdot p\cdot \phi(p) \quad \Leftarrow \quad \phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,0)\cdot e^{-ipx/\hbar}\cdot dx$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp\cdot\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}\right]\cdot p\cdot\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\cdot\Psi(x')\cdot e^{-\frac{ipx'}{\hbar}}\right]$$

dp積分先作

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\int_{-\infty}^{\infty} dx'\cdot\Psi(x')\int_{-\infty}^{\infty} dp\cdot pe^{-\frac{ip(x'-x)}{\hbar}}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\cdot\Psi(x')\int_{-\infty}^{\infty} dp\cdot e^{-\frac{ip(x'-x)}{\hbar}}\right]$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\cdot\Psi(x')\cdot\delta(x'-x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\cdot e^{ipx/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(x)$$

$$\langle p\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\boxed{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}\Psi(x) \quad \Longleftrightarrow \quad \langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\cdot x\Psi(x)$$

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\Psi^*(x)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)(x)$$

這個表示式中的微分有點熟悉！

終極翻譯表，直接由粒子圖像翻譯為波函數的運算！

$$\frac{\partial}{\partial x}\leftrightarrow ik$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\leftrightarrow -i\omega$$

$$p=\hbar k$$

$$E=\hbar\omega$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\leftrightarrow p$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\leftrightarrow E$$

動量翻譯為空間微分運算

能量翻譯為時間微分運算

這可能不是巧合！

大膽推想：動量的函數（比如動能）的期望值

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x) \longrightarrow \hat{p} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\langle f(\hat{p}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x)$$

例如漢米爾頓量的期望值$\langle \hat{H} \rangle$：

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot \frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2}\right)$$

以上的對應提供一個處方來計算其他物理量測量的期望值。

所有古典物理量都可以寫成位置與動量的多項式函數： $f(x,p)$

因此，何不假設所有古典物理量的期望值都可以寫成.....

$$\langle f(x,p)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot f\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)$$

例如z方向角動量：

$$\langle(\vec{r}\times\vec{p})_z\rangle = \langle xp_y - yp_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} \cdot \Psi^*(\vec{r}) \cdot \left[x\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - y\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi(\vec{r})$$

當初只是幫助猜想的翻譯表，現在可以稍加修改，正式地搬上量子力學檯面，

我們將波函數的空間微分運算，定義為量子力學的動量算子Operator $\hat{p}$ ！

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \equiv \hat{p}$$

將波函數乘上位置的運算定義為量子力學的位置算子Operator $\hat{x}$ ！

$$\hat{x} \equiv x$$

有古典對應的物理量就用與古典一樣的形式來組合位置與動量算子：

$$f(x,p) \to \hat{f}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \equiv f(\hat{x},\hat{p})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$

古典　　　　　　　　　　量子

大膽地假設，所有物理量都對應作用於波函數的運算算子！

該物理量的期望值，就是此運算作用於狀態的波函數，

乘上波函數的複數共軛，最後對空間積分！

$$\langle f(x,p)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot f\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)$$

量子力學的原則完整版

某一個瞬間時刻的狀態 $\longrightarrow$ 狀態函數 $\psi(x)$

物理量測量 $\longrightarrow$ 運算子 $\hat{A}$

位置算子為乘上位置座標，動量算子為對空間微分：$\hat{x} \equiv x, \hat{p} \equiv -i\hbar \dfrac{d}{dx}$

有古典對應的物理量，就直接將位置算子及動量算子代入同樣的數學形式：

$$f(x,p) \to \hat{f}\left(x, -i\hbar \frac{d}{dx}\right) \equiv f(\hat{x},\hat{p})$$

就得到量子力學對應的算子。

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{A}\psi(x)$$

把對應算子放入此式就可得到測量期望值。

對一物理量$\hat{A}$測量，結果完全確定的狀態， $\hat{A}\psi_a(x) = a\psi_a(x)$

就是該物理量對應算子$\hat{A}$的本徵函數$\psi_a(x)$，本徵值a就是測量結果。

以上原則對每一個時間的瞬間都成立！

瞬間狀態隨時間演化 $\longrightarrow$ 波函數 $\Psi(x,t)$

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

狀態函數隨時間的演化由漢米爾頓量來負責！

習題二：Chapter 2 1,8,9　建議題（不交） 16,17,18

1. Given that $A(k) = N/(k^2 + \alpha^2)$, calculate $\psi(x)$. Plot $A(k)$ and $\psi(x)$ and show that $\Delta k\, \Delta x > 1$, independent of the choice of α.

EXAMPLE 2-1

Consider a wave packet for which

$$A(k) = N \qquad -K \le k \le K$$
$$= 0 \qquad \text{elsewhere}$$

Calculate $\psi(x, 0)$, and use some reasonable definition of the width to show that (2-8) is satisfied.

SOLUTION We have

$$\psi(x, 0) = \int_{-K}^{K} dk\, Ne^{ikx} = \frac{N}{ix}(e^{iKx} - e^{-Kx}) = 2N\frac{\sin Kx}{x}$$

The definition of $A(k)$ easily shows that $\Delta k = 2K$. A reasonable definition of Δx might be the distance between the two points at which $\psi(x)$ first vanishes as it gets away from $x = 0$. This happens when $Kx = \pm\pi$, so that $\Delta x = 2\pi/K$. It follows that

$$\Delta k\, \Delta x = 4\pi$$

which certainly satisfies (2-8).

$$\int_0^\infty \frac{\cos(mx)}{x^2 + a^2}\, dx = \frac{\pi}{2|a|} e^{-|ma|}$$

8. Consider a wave function of the form

$$\psi(x) = Ae^{-\mu|x|}$$

Calculate the wave function in momentum space $\phi(p)$.

9. Consider the example in Problem 8. Calculate A so that $\psi(x)$ is properly normalized.

16. Consider the wave function

$$\psi(x) = (\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha x^2/2)$$

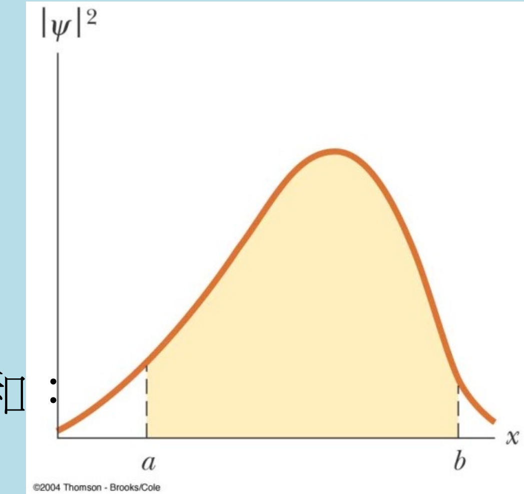
Calculate $\langle x^n \rangle$ for $n = 1, 2$. Can you quickly write down the result for $\langle x^{17} \rangle$?

17. Calculate $\phi(p)$ for the wave function in problem 16. Calculate $\langle p^n \rangle$ for $n = 1, 2$.

18. Use the definitions $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ and $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ with the results of Problems 16 and 17 to show that $\Delta p \Delta x > \hbar/2$.

摘要

$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{n} Q_i P_i$$



位置的期望值 （平均值）即是以機率為權重對位置求和：

位置為連續變數，因此需做積分。

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot x \cdot \Psi(x)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x)$$

我們將波函數的空間微分運算，定義為量子力學的動量算子Operator $\hat{p}$ ！

摘要

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \equiv \hat{p}$$

將波函數乘上位置的運算定義為量子力學的位置算子Operator $\hat{x}$ ！

$$\hat{x} \equiv x$$

有古典對應的物理量就用與古典一樣的形式來組合位置與動量算子：

$$f(x,p) \rightarrow \hat{f}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \equiv f(\hat{x},\hat{p})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$

古典　　　　量子

大膽地假設，所有物理量都對應作用於波函數的運算算子！

該物理量的期望值，就是此運算作用於狀態的波函數，

乘上波函數的複數共軛，最後對空間積分！

$$\langle f(x,p)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot f\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)$$