

假設某時間時，瞬間波函數可以寫成：

$$Ae^{-\mu|x|}$$

考慮其歸一化條件，並計算機率密度。

Consider a wave packet formed by using the wave function $Ae^{-\alpha|x|}$, where A is a constant to be determined by normalization. Normalize this wave function and find the probabilities of the particle being between 0 and $1/\alpha$, and between $1/\alpha$ and $2/\alpha$.

Strategy This wave function is sketched in Figure 6.1. We will use Equation (6.8) to normalize Ψ . Then we will find the probability by using the limits in the integration of Equation (6.7).

Solution If we insert the wave function into Equation (6.8), we have

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\alpha|x|} dx = 1$$

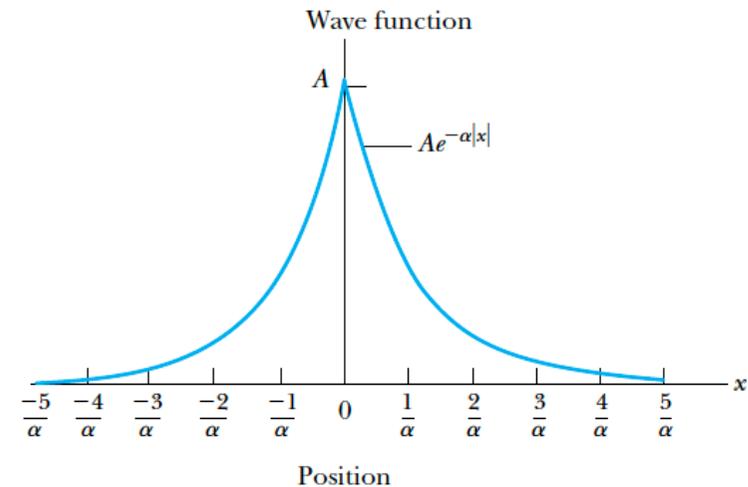


Figure 6.1 The wave function $Ae^{-\alpha|x|}$ is plotted as a function of x . Note that the wave function is symmetric about $x = 0$.

Consider a wave packet formed by using the wave function $Ae^{-\alpha|x|}$, where A is a constant to be determined by normalization. Normalize this wave function and find the probabilities of the particle being between 0 and $1/\alpha$, and between $1/\alpha$ and $2/\alpha$.

Strategy This wave function is sketched in Figure 6.1. We will use Equation (6.8) to normalize Ψ . Then we will find the probability by using the limits in the integration of Equation (6.7).

Solution If we insert the wave function into Equation (6.8), we have

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\alpha|x|} dx = 1$$

Because the wave function is symmetric about $x = 0$, we can integrate from 0 to ∞ , multiply by 2, and drop the absolute value signs on $|x|$.

$$2 \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\alpha x} dx = 1 = \frac{2A^2}{-2\alpha} e^{-2\alpha x} \Big|_0^{\infty}$$

$$1 = \frac{-A^2}{\alpha} (0 - 1) = \frac{A^2}{\alpha}$$

The coefficient $A = \sqrt{\alpha}$, and the normalized wave function Ψ is

$$\Psi = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$$

We use Equation (6.7) to find the probability of the particle being between 0 and $1/\alpha$, where we again drop the absolute signs on $|x|$ because x is positive.

$$P = \int_0^{1/\alpha} \alpha e^{-2\alpha x} dx$$

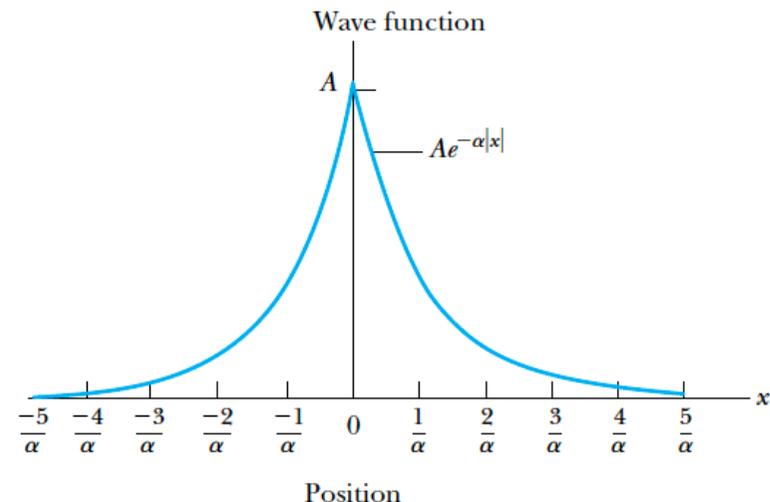


Figure 6.1 The wave function $Ae^{-\alpha|x|}$ is plotted as a function of x . Note that the wave function is symmetric about $x = 0$.

The integration is similar to the previous one.

$$P = \frac{\alpha}{-2\alpha} e^{-2\alpha x} \Big|_0^{1/\alpha} = -\frac{1}{2} (e^{-2} - 1) \approx 0.432$$

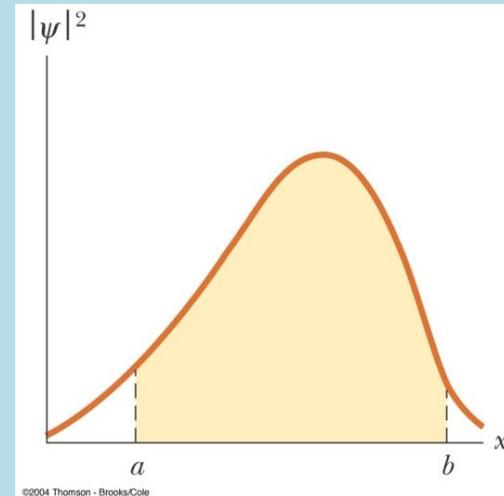
The probability of the particle being between $1/\alpha$ and $2/\alpha$ is

$$P = \int_{1/\alpha}^{2/\alpha} \alpha e^{-2\alpha x} dx$$

$$P = \frac{\alpha}{-2\alpha} e^{-2\alpha x} \Big|_{1/\alpha}^{2/\alpha} = -\frac{1}{2} (e^{-4} - e^{-2}) \approx 0.059$$

We conclude that the particle is much more likely to be between 0 and $1/\alpha$ than between $1/\alpha$ and $2/\alpha$. This is to be expected, given the shape of the wave function shown in Figure 6.1.

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



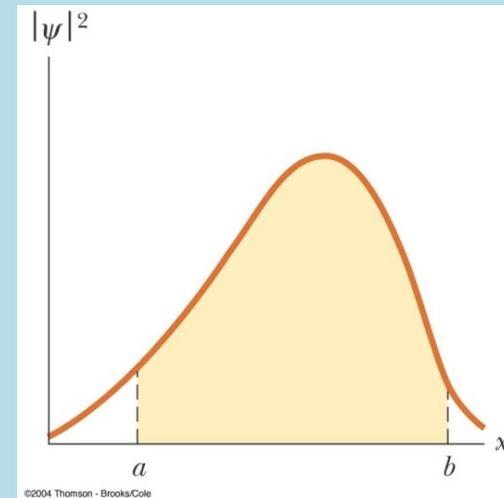
位置的期望值（平均值）即是以機率為權重對位置求和：

位置為連續變數，因此需做積分。

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

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。

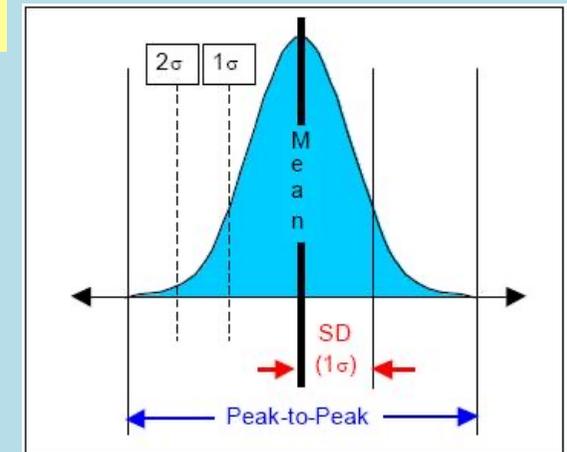
$$(\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

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。

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

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

讓我們試一下計算波包的不確定性 $\Delta x, \Delta p$ 。

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

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

$$\Psi(x, 0) = C e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} = C e^{ik_0 x} e^{-\frac{a}{2}x^2}$$

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

首先要將波包函數歸一化：

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \Psi(x) = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot e^{-ik_0 x} e^{ik_0 x} e^{-ax^2} = C^2 \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

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

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

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

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

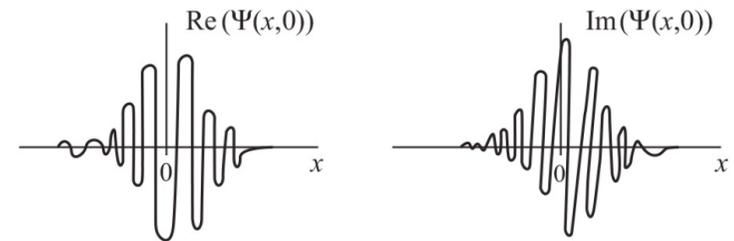
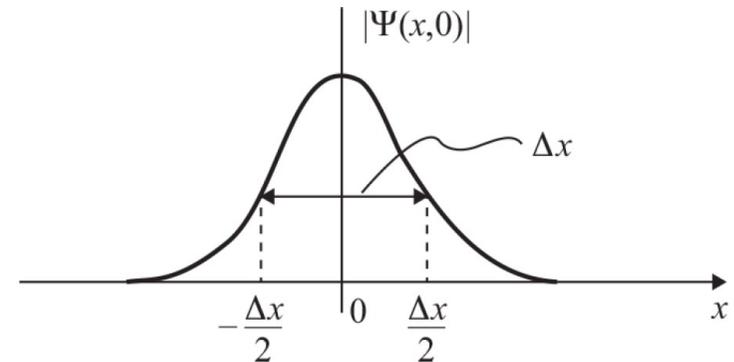
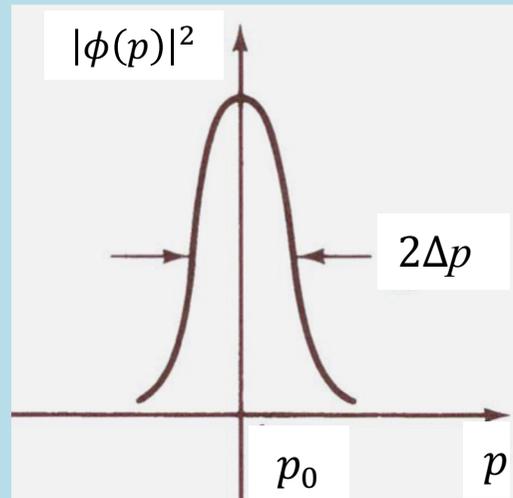


Figure 4.2
The real and imaginary parts of $\Psi(x, 0)$.



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：

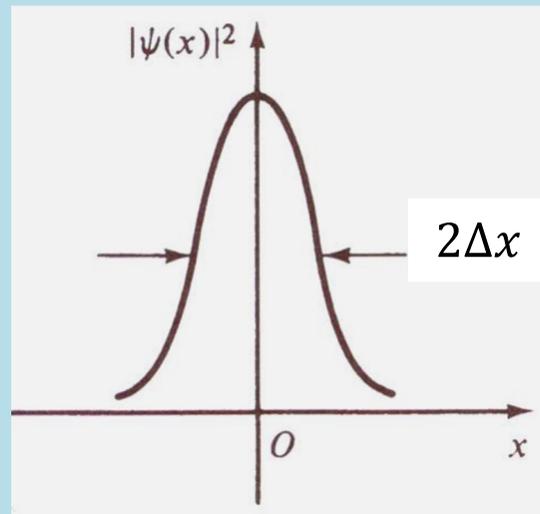


若取極值的 $1/e$ 左右位置為寬度，

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

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

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：

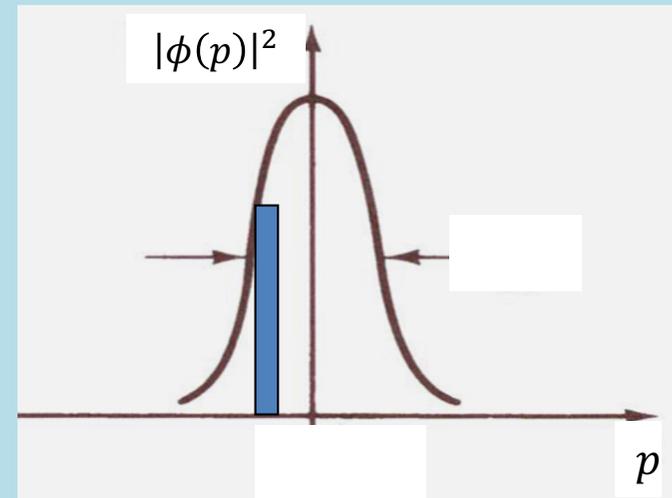
$$|\phi(p)|^2 \cdot dp = \phi^*(p) \cdot \phi(p) \cdot dp$$

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：

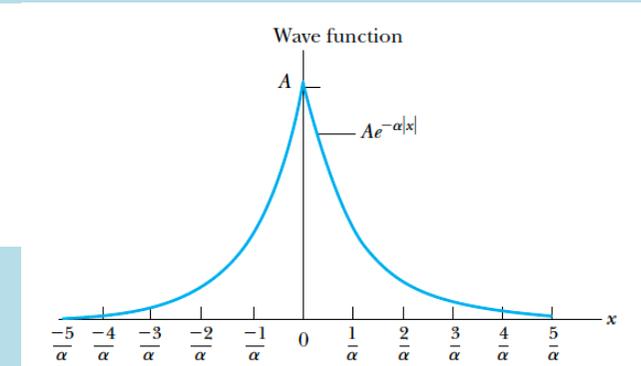
$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) \cdot |\phi(p)|^2 \cdot dp = \int_{-\infty}^{\infty} dp \cdot \phi^*(p) \cdot f(p) \cdot \phi(p)$$



Consider a wave function of the form

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-\mu|x|}$$

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



$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\mu|x|} \cdot e^{-ipx/\hbar} \cdot dx = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\int_{-\infty}^0 e^{(\mu-ip/\hbar)x} \cdot dx + \int_0^{\infty} e^{-(\mu+ip/\hbar)x} \cdot dx \right]$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{e^{(\mu-ip/\hbar)x}}{\mu - ip/\hbar} \Big|_{-\infty}^0 + \frac{e^{-(\mu+ip/\hbar)x}}{\mu + ip/\hbar} \Big|_{-\infty}^0 \right]$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{1}{\mu - ip/\hbar} + \frac{1}{\mu + ip/\hbar} \right] = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\mu}{\mu^2 + (p/\hbar)^2}$$

$$A = \sqrt{\mu}$$

可以驗證：

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p)|^2 \cdot dp = 1$$

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 $\langle \hat{H} \rangle$:

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

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：

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

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

古典



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

量子

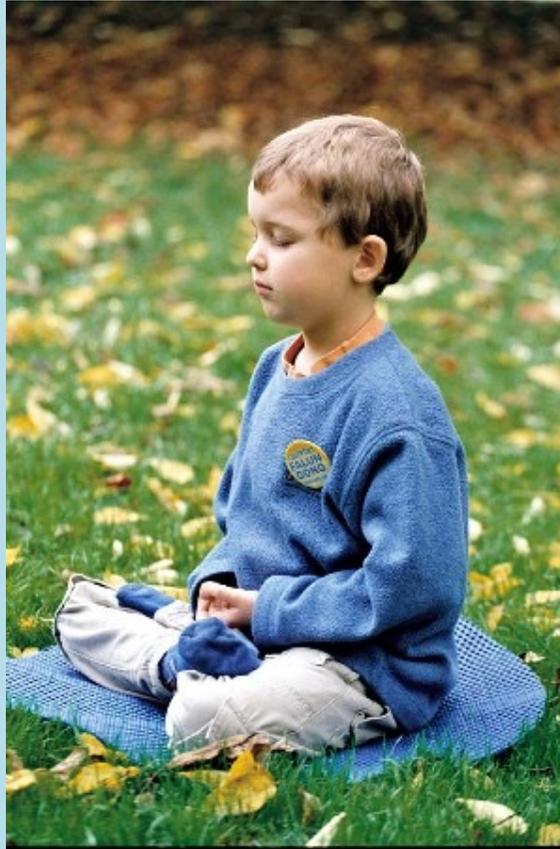
大膽地假設，所有物理量都對應作用於波函數的運算算子！

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！

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

位能下薛丁格方程式的解



定態 **Stationary State**

能量的本徵函數

定態波函數，時間部分與空間部分可以分離：

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$$

代入薛丁格方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

得到：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{d\phi(t)}{dt}$$

左右都除以 $\psi(x) \cdot \phi(t)$ ：

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt}$$

現在左邊只與 x 有關，右邊只與 t 有關，兩者是獨立變數！

這不可能，唯一例外是左右兩式與兩者都無關，是一常數。設為 E 。

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} \equiv E$$

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t) \quad \rightarrow \quad \phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

定態波函數，時間部分不只可以被分離，而且可以被完全決定，與位能 $V(x)$ 的關係完全濃縮在數 E 之中！

$$\phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Psi(x, t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

定態波函數的時間演化就是函數 $\psi_E(x)$ 乘上一個**Phase factor**： $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ 。

將以上的波函數 $\Psi(x, t)$ 對時間微分，會等於常數 E 乘上此波函數 $\Psi(x, t)$ ：

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

注意：量子力學的能量翻譯為對時間微分的運算： $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

所以對於定態，量子能量算子的運算，如同乘上一個數值 E 。

這好像回到了古典。

大膽推測：對這些解， E 就是能量測量結果，

而且像古典一樣，只有一個確定值。

之後我們將正式證明對於定態，能量的測量的確沒有不確定性！

$$\Delta E = 0$$

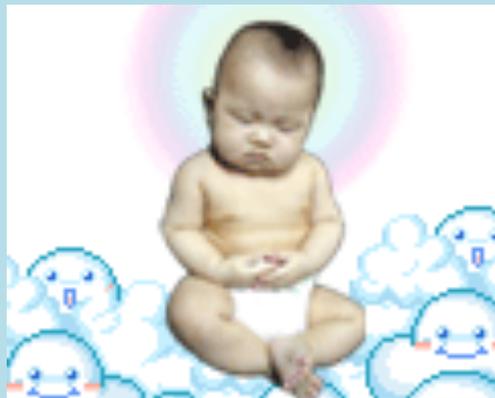
$\Psi(x, t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ 定態真的是淡定。

機率密度與時間無關。

$$P = |\Psi|^2 = \left| \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi_E(x)|^2 |e^{-i\frac{E}{\hbar}t}|^2 = |\psi_E(x)|^2$$

其他物理測量的期望值也都與時間無關！

$$\begin{aligned} \langle f(x, p) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_E^*(x) e^{i\frac{E}{\hbar}t} f\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_E^*(x) f\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_E(x) \end{aligned}$$



$$\Psi(x, t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

時間只改變了 $\psi_E(x)$ 在複數平面的相角 Phase。

物理測量只與 $\psi_E(x)$ 的絕對值有關，獨立的phase變化沒有物理結果。

因此可以說定態的電子一直是處於同一個狀態！就是 $\psi_E(x)$ 所決定的電子狀態。

空間部分函數 $\psi_E(x)$ 沒有隨時間變！只是換了不同版本！這就是可分離性的意義。

While a stationary state wave function $\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$ depends on time, it is physically time independent. This is, in fact, the content of observation (1) above; no expectation value shows time dependence. We can see this time independence more conceptually as follows. Consider the stationary state at time t and at time $t + t_0$, with t_0 some arbitrary constant time. We see that

$$\Psi(x, t + t_0) = e^{-iE(t+t_0)/\hbar}\psi(x) = e^{-iEt_0/\hbar}\Psi(x, t). \quad (6.1.22)$$

Since the stationary-state wave functions at t and at $t + t_0$ differ by an overall *constant* phase, they are physically equivalent, they are the *same* state. The phase is a constant because it has no t or x dependence. We have

時間部分已解出，現在我們來寫定態解空間位置部分 $\psi(x)$ 滿足的方程式：

定態解的特點是：時間部分與空間部分分離：

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} \equiv E$$

位置函數 $\psi(x)$ 對應特定的 E ，因此將 E 寫在足標： $\psi_E(x)$ ：

$\psi_E(x)$ 滿足此常微分方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$

Time-Independent Schrodinger Wave Equation

與時間無關之薛丁格方程式。

定態波函數的空間部分所滿足的方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$



解出位置函數 $\psi_E(x)$ ，整個定態波函數 $\Psi(x, t)$ 就都知道了！

$$\Psi(x, t) = \psi_E(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

單獨的Phase，沒有物理意義，定態的電子一直是處於同一個狀態！

函數 $\psi_E(x)$ 決定了定態的狀態，也就是在時間為零時的波函數 $\Psi(x, 0)$ ！

在很多情況下，這個方程式只對某一些能量 E ，可以得到解。

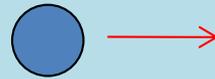
這些能量 E ，稱為**本徵值 Eigenvalues**，

對應的解 $\psi_E(x)$ 稱為漢米爾頓量的**本徵函數 Eigenfunction**。

本徵值 E ，若是離散分布，能量就是量子化的！

從非束縛態開始。首先是大家已經很熟悉的自由電子波，這是定態！

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi_E$$



當電子受力為零時，位能 V 是一常數， $V(x) = V_0$

假設 $E > V_0$ 不直接設為零，是因為所得結果可以在一維位能問題運用。

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E]\psi_E \equiv -k^2\psi_E$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

動能

很容易猜到這就是角波數。

其解很簡單，二次微分後與自己成正比，就是指數函數

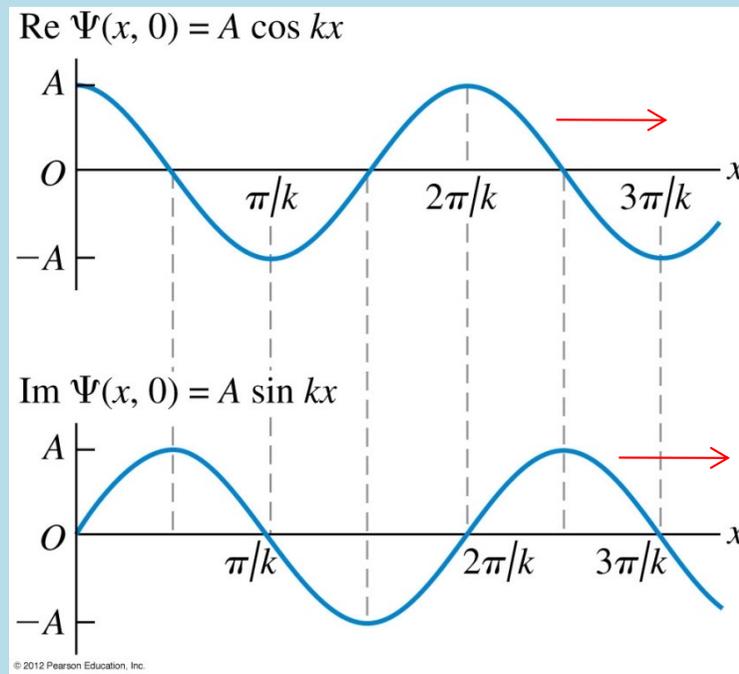
$$a^2 = -k^2 \quad a = \pm ik \quad a \text{ 有兩個解！}$$

$$\frac{d^n}{dx^n} e^{ax} = (a)^n \cdot e^{ax}$$

$$\psi_E = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

這是二次微分方程式，上式有兩個未知係數，因此已經是最普遍的解了

自由電子定態



$$\psi_E = Ae^{ik(E)x} + Be^{-ik(E)x}$$

完整的波函數：

$$k(E) \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

$$\Psi(x, t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = Ae^{i[k(E)x - \frac{E}{\hbar}t]} + Be^{-i[k(E)x + \frac{E}{\hbar}t]}$$

相位分別向 $+x$ 與 $-x$ 方向運動！這當然就是已經解過的平面正弦自由電子波。
當時以角波數 k 來標記， k 決定 $\omega(k)$ ，現在倒過來以能量 E 來標記，決定 $k(E)$ 。

注意：任意的 E 數值，只要大於 V_0 ，定態方程式都有解！

$$\Psi(x, t) = Ae^{i\left[k(E)x - \frac{E}{\hbar}t\right]}$$

單一角波數 k 的電子波定態，波長確定，動量確定，機率密度為一常數。

$$P = |\Psi|^2 = |A|^2$$

因為沒有任何位置資訊，所以稱它為沿 $+x$ 方向運動並不確實，它只是擁有 $+x$ 方向的動量，但並沒有任何東西是在傳播之中。

畢竟這是定態的電子，它的物理當然完全不隨時間變化。

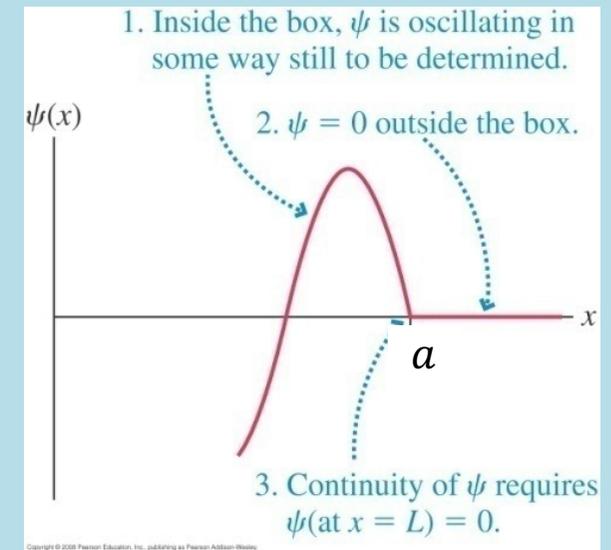
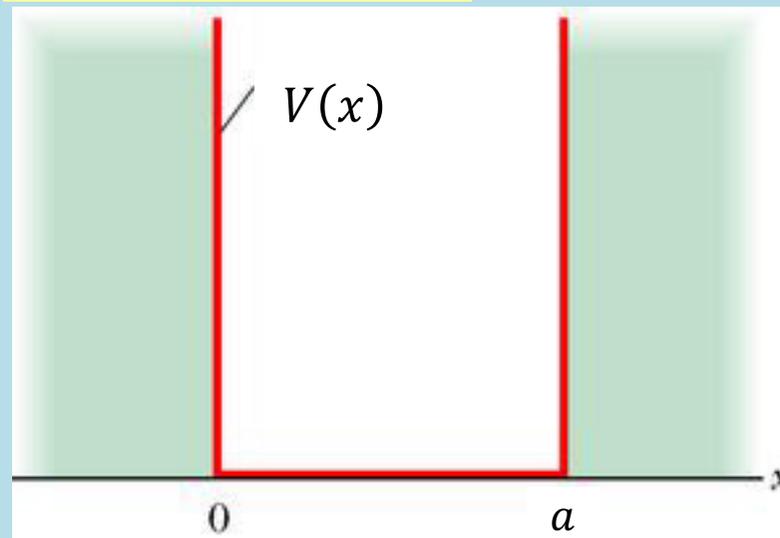
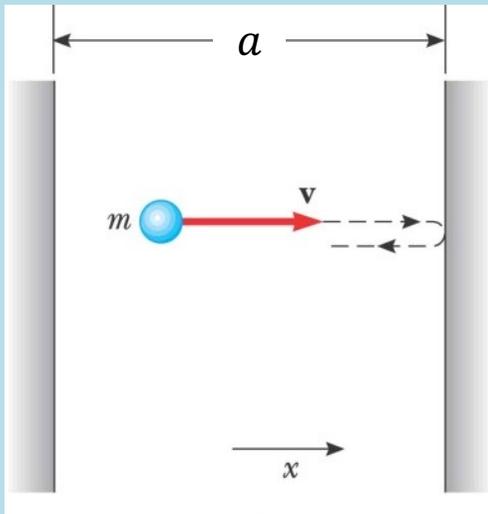
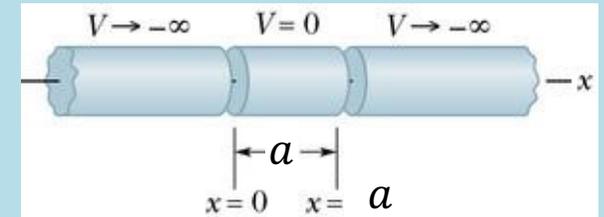
接著討論一個典型束縛態。

無限位能井，盒子中自由電子的定態。

$$V(x) = \infty \quad x < 0$$

$$= 0 \quad 0 < x < a$$

$$= \infty \quad a < x$$



邊界外的位能是無限大，波函數必須為零。否則位能期望值會是無限大！

邊界內波函數必須在邊界上與邊界外波函數連續，

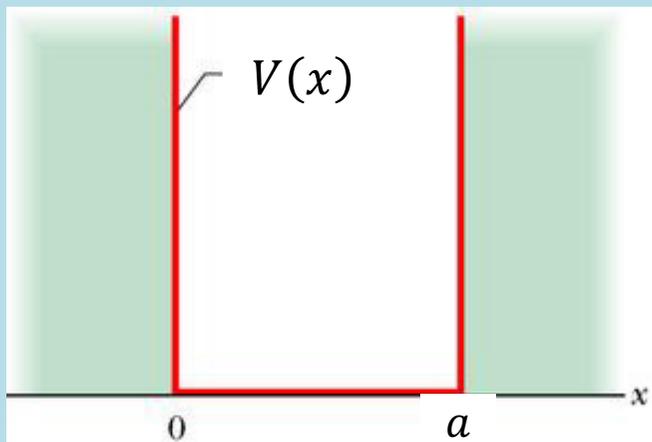
因此邊界內波函數在邊界上必須為零。

$$\text{邊界條件，對任何時間：} \quad \Psi(0, t) = \Psi(a, t) = 0$$

$$\psi_E(0) = 0$$

$$\psi_E(a) = 0$$

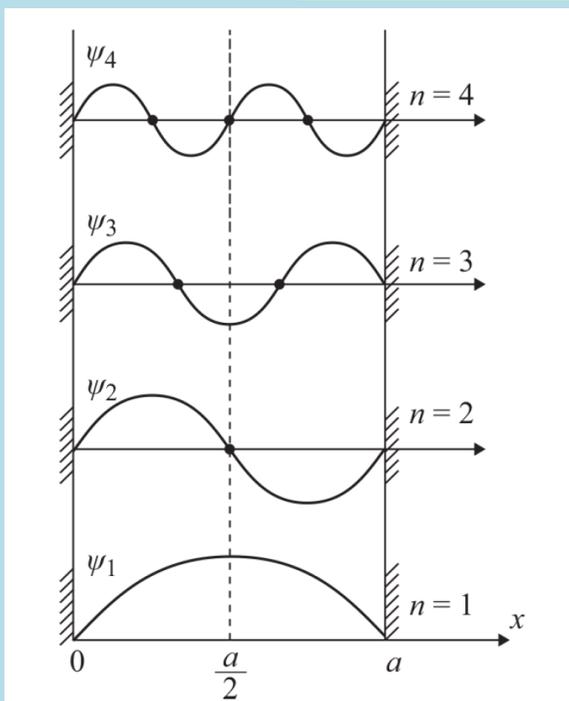
有邊界之自由電子



邊界條件：

$$\psi_E(0) = 0$$

$$\psi_E(a) = 0$$



在邊界內，如同自由電子，因此可延用自由電子波。

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_E \quad \equiv -k^2\psi_E$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = -k^2\psi_E$$

$$\psi_E = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

但必須加上邊界條件：

$$\psi_E(0) = 0 \quad \longrightarrow \quad A + B = 0$$

$$\psi_E = Ae^{ikx} - Ae^{-ikx} = 2iA \sin kx$$

$$\psi_E = C \sin kx$$

重新定義常數： $C \equiv 2iA$

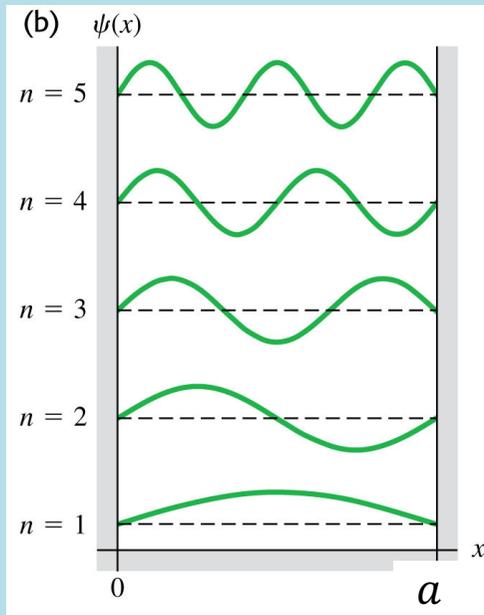
$$\psi_E(a) = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_E(a) = C \sin ka = 0$$

$$ka = n\pi \quad n \text{ 是自然數。}$$

$$\psi_n = C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

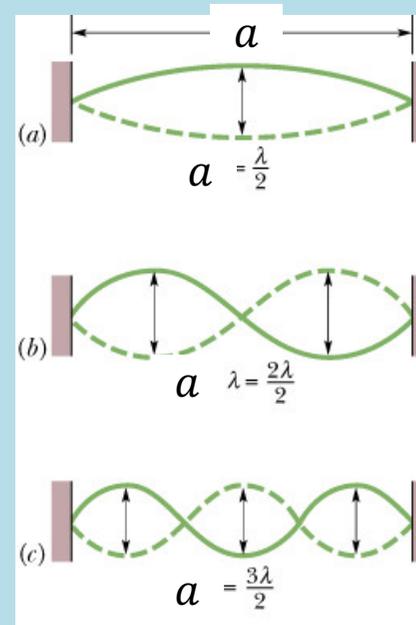
$$k = \frac{n\pi}{a}$$

結果與弦波駐波的波函數幾乎一模一樣！



$$k = \frac{n\pi}{a}$$

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{a}{n}$$



解可以以量子數 n 編號，給它一個新的符號 u_n ：

$$\psi_n = u_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

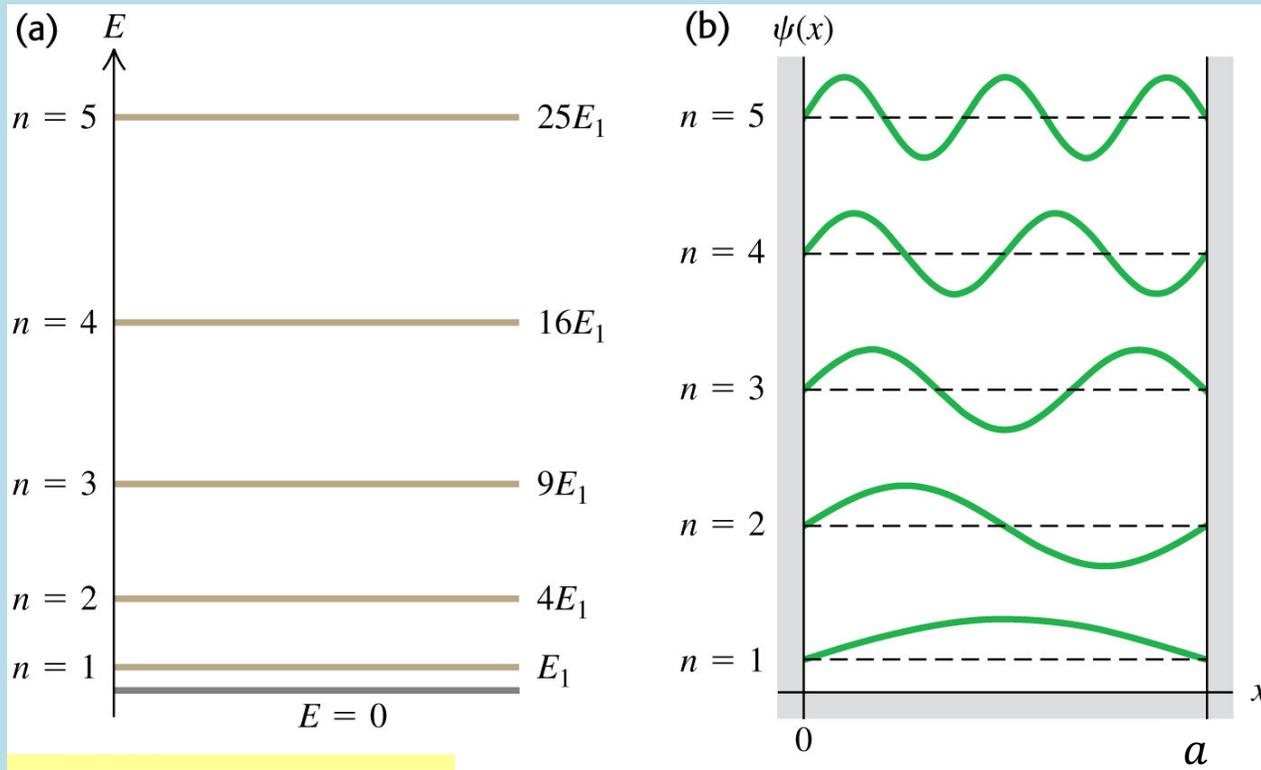
$$y = \left(y_m \cdot \sin\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot \cos \omega t$$

原則上常數 C 可以是任意複數。

但只有 C 的絕對值對物理有影響，常常就取 C 為實數。如此 u_n 就完全是實數函數，但波函數 Ψ_n 還要乘上時間的部分。完整的解並不是實數！

$$\Psi_n(x, t) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot e^{-i\omega t}$$

有邊界之電子束縛態波函數的實數部如同駐波，但它必得有虛數部。



$u_n = C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ 代回去與時間無關的薛丁格方程式：

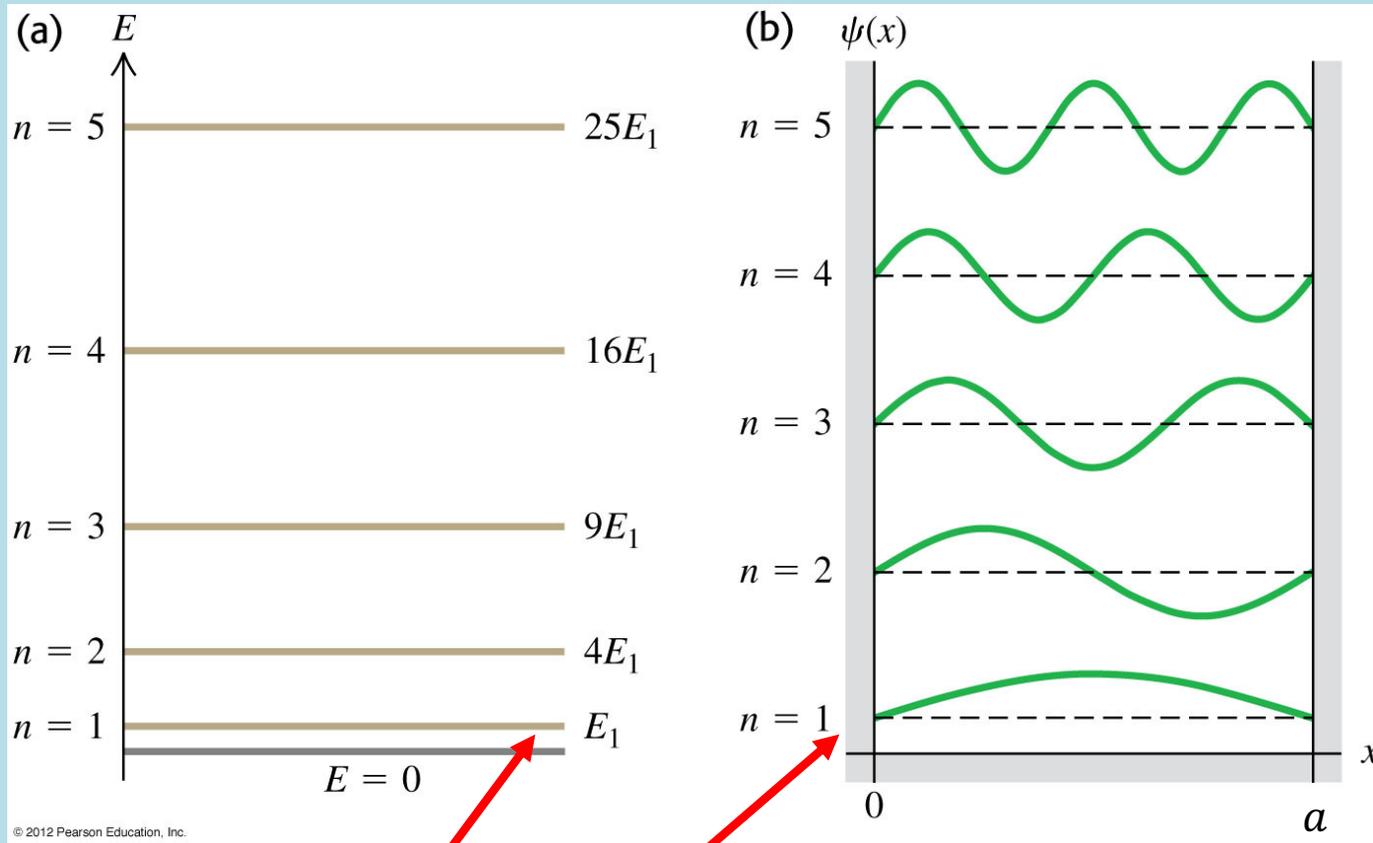
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = E\psi_E(x) = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\pi^2}{a^2} n^2 \psi_E(x)$$

能量 E 等於：

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\pi^2}{a^2} n^2 = \left(\frac{h^2}{8ma^2}\right) n^2$$

能量只有在這些值，與時無關薛丁格方程式才有滿足邊界條件的解！

這些定態，能量是量子化的。以後會證明無限位能井的任意解能量測量只會是 E_n 。



© 2012 Pearson Education, Inc.

$$E_1 = \left(\frac{h^2}{8ma^2} \right)$$

有一能量最低的基態，能量不為零！

注意基態的動量不為零。

電子是靜不下來的！

這是測不準原理的結果。



總機率必須等於 1

$$\int_0^a |\Psi_n(x, t)|^2 dx = \int_0^a |u_n(x)|^2 dx = 1$$

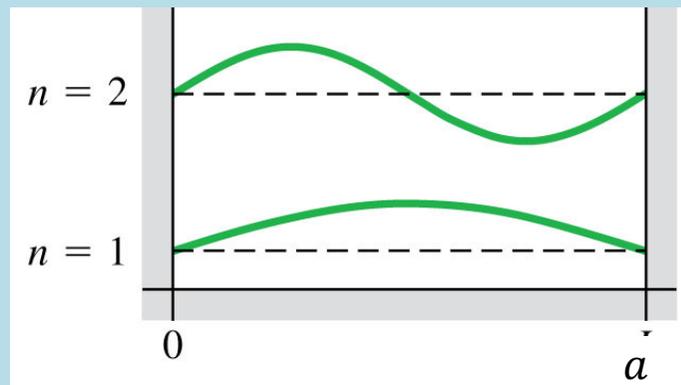
由歸一化條件可以解出係數 C

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

$$|C| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

只有 C 的絕對值對物理有影響。所以常就直接取實數。



機率密度

$$P = |u_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \left[\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right]^2$$

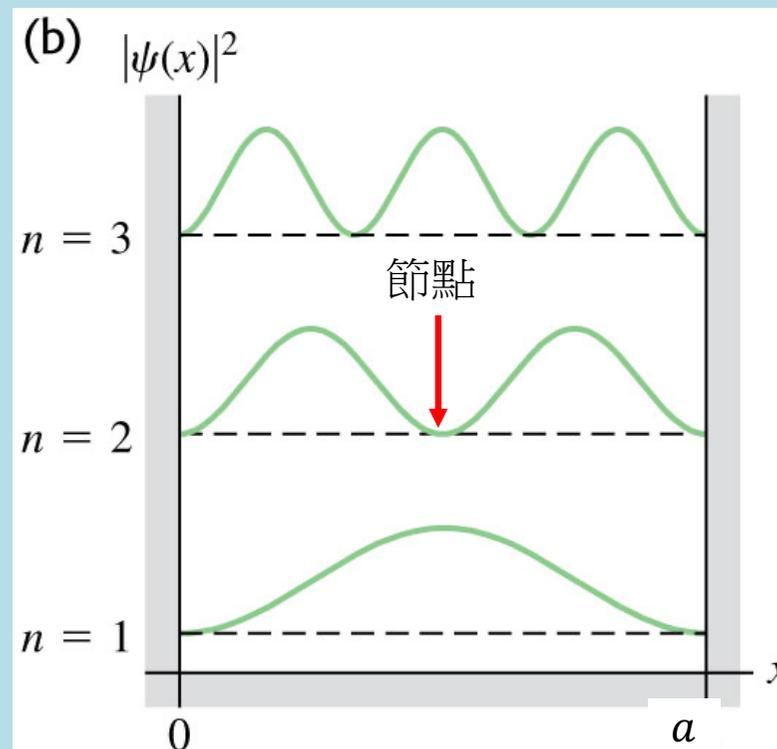
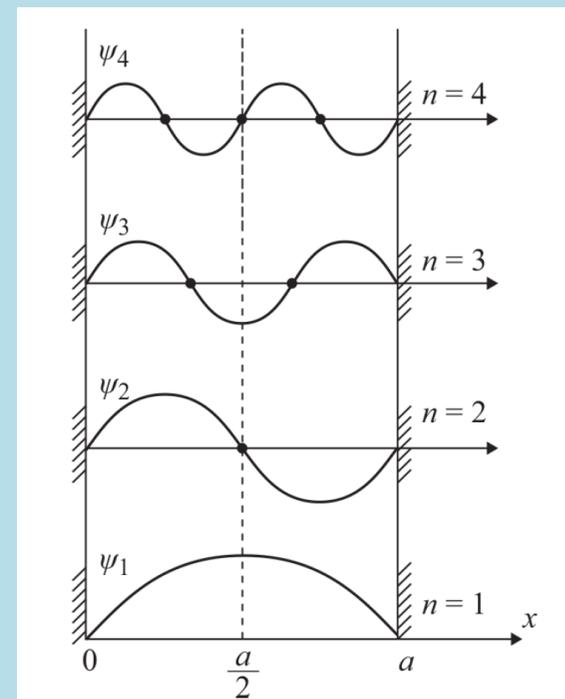
$$P\left(\frac{m}{n}a\right) = 0, m < n \quad \text{稱為節點。}$$

在節點處， P 一直為零，永遠不可能發現該電子！



此電子靜不下來，但在節點卻永遠找不到它！

注意： $n - 1$ 即是節點數目！



我們很容易就計算這些定態解的各個期望值：
因為對稱的關係：

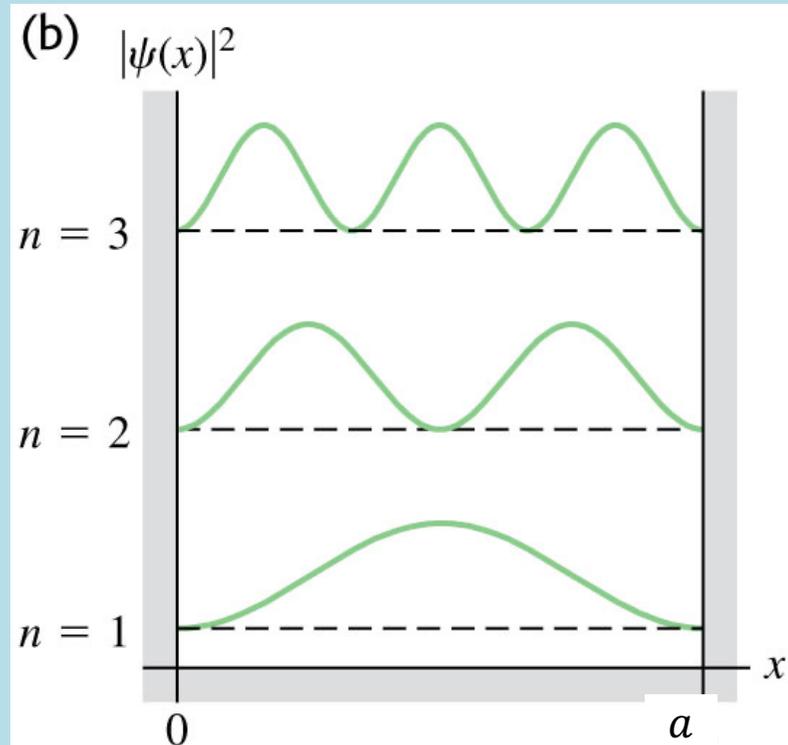
$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = ?$$

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

$$\begin{aligned} &= -i\hbar \int_0^a dx \cdot u_n(x) \left(\frac{d}{dx} u_n(x) \right) = \int_0^a dx \cdot \frac{d}{dx} u_n^2 \\ &= \frac{-i\hbar}{2} [u_n^2(a) - u_n^2(0)] = 0 \end{aligned}$$

$$\langle p \rangle = 0$$



$$\langle p^2 \rangle = ?$$

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

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

$$= -\hbar^2 \int_0^a dx \cdot u_n(x) \left(\frac{d^2}{dx^2} u_n(x)\right) = -\left(\hbar \frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{2}{a} \int_0^a dx \cdot \left[\sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)\right]^2$$

$$= \left(\hbar \frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{2}{a} \int_0^a dx \cdot \left[\frac{1 - \cos\left(2\frac{n\pi}{a} x\right)}{2}\right] = \left(\hbar \frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{2}{a} \frac{a}{2} = \left(\hbar \frac{n\pi}{a}\right)^2$$

我們得到動量測量的不準度：

$$\Delta p \equiv \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} = \frac{\hbar \pi n}{a}$$

而且得到動量平方的期望值就是能量 $2mE_n$ ！

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

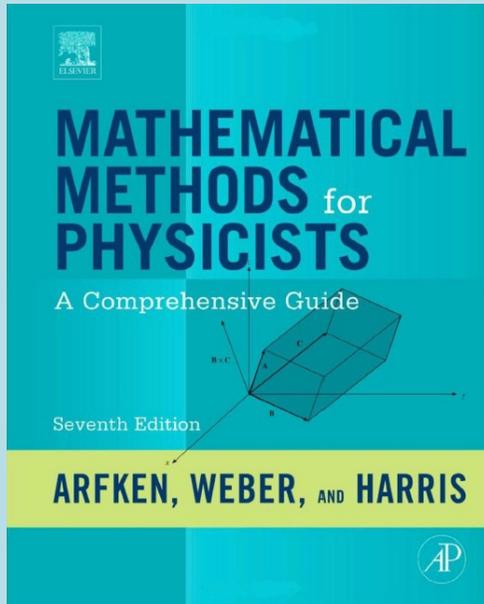
$$\langle p^2 \rangle = \left(\hbar \frac{n\pi}{a}\right)^2 = (\hbar k)^2 = 2mE_n$$

這應該表示：

$$E_n = \langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle$$

E_n 就是 \hat{H} 的期望值！這進一步驗證了期望值計算的方法是正確的。

與時間無關的薛丁格方程式並不是波方程式，而是 \hat{H} 的本徵函數方程式！



CHAPTER 6

EIGENVALUE PROBLEMS

特徵值、本徵值

6.1 EIGENVALUE EQUATIONS 線性算子具有本徵函數 eigenfunction。

Many important problems in physics can be cast as equations of the generic form

$$A\psi = \lambda\psi, \quad (6.1)$$

where A is a linear operator whose domain and range is a Hilbert space, ψ is a function in the space, and λ is a constant. The operator A is known, but both ψ and λ are unknown, and the task at hand is to solve Eq. (6.1). Because the solutions to an equation of this type yield functions ψ that are unchanged by the operator (except for multiplication by a scale factor λ), they are termed **eigenvalue equations**: **Eigen** is German for “[its] own.” A function ψ that solves an eigenvalue equation is called an **eigenfunction**, and the value of λ that goes with an eigenfunction is called an **eigenvalue**.

與時間無關的薛丁格方程式也可以以 \hat{H} 運算子表述：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

左邊就是量子力學中對應的Hamilton運算子：

固定能量解 ψ_E 滿足與時間無關的薛丁格方程式可以寫成：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] \psi_E = E\psi_E$$

也就是：

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E$$

Many important problems in physics can be cast as equations of the generic form

$$A\psi = \lambda\psi, \quad (6.1)$$

where A is a linear operator whose domain and range is a Hilbert space, ψ is a function in the space, and λ is a constant. The operator A is known, but both ψ and λ are unknown,

數學上這個關係稱為運算子 \hat{H} 的本徵函數問題！

原來，與時間無關的薛丁格方程式並不是波方程式，而是 \hat{H} 的本徵函數方程式！

定態的 ψ_E 是 \hat{H} 的本徵函數 Eigenfunction！對應的本徵值 Eigenvalue 為 E 。

能量的本徵函數，之前稱為定態，有很多重要的性質！

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E$$

計算處於定態 ψ_E 的電子的 \hat{H} 的期望值： $\langle \hat{H} \rangle$

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_E^*(x) \cdot \hat{H}\psi_E(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_E^*(x) \cdot E\psi_E(x) \\ &= E \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_E^*(x) \cdot \psi_E(x) = E\end{aligned}$$

$$\langle \hat{H} \rangle = E$$

本徵函數 $\psi_E(x)$ 描述的定態的能量的期望值就是本徵值 E 。不意外！

計算本徵函數 u_n 描述的電子狀態的能量測量不確定性： ΔH 。

$$(\Delta H)^2 \equiv \langle (\hat{H} - \langle \hat{H} \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle \hat{H}^2 - 2\langle \hat{H} \rangle \hat{H} + \langle \hat{H} \rangle^2 \rangle = \langle \hat{H}^2 \rangle - 2\langle \hat{H} \rangle^2 + \langle \hat{H} \rangle^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$$

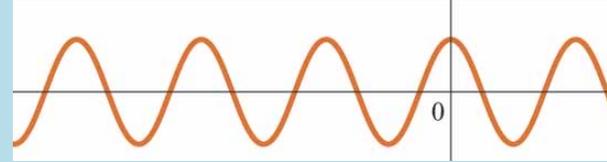
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \cdot \hat{H}^2 \psi_E(x) - E^2 = E \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \cdot \hat{H} \psi_E(x) - E^2 = E^2 - E^2 = 0$$

處於定態 ψ_E 的電子，能量的測量值為 E ，完全沒有不確定性！ $\Delta H = 0$

可以說定態 ψ_E 是具有特定確定能量的測量值為 E 的狀態。這是定態第三個意義。

對於自由粒子波狀的態，動量是確定的（但位置測量不確定）：

$$u_p(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$



這果然如預期是動量算子的本徵函數：

$$\hat{p}u_p(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{i\frac{p}{\hbar}x} = p \cdot u_p(x)$$

$$\Delta p = 0$$

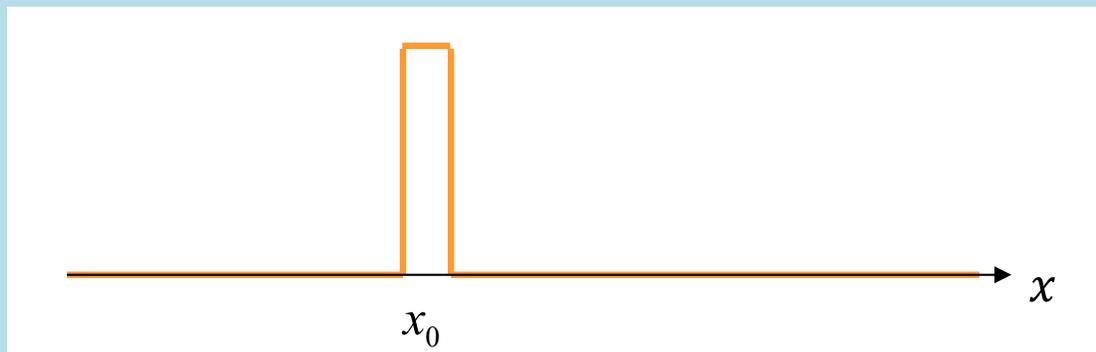
剛剛作完位置測量的粒子，設其位置為 x_0 ，則其波函數只有在此處不為零！
波函數是一個delta function！

$$u_{x_0} = \delta(x - x_0)$$

這是位置算子 \hat{x} 的本徵函數：

$$\hat{x}u_{x_0} = x \cdot \delta(x - x_0) = x_0 \cdot \delta(x - x_0) = x_0 \cdot u_{x_0}$$

$$\Delta x = 0$$

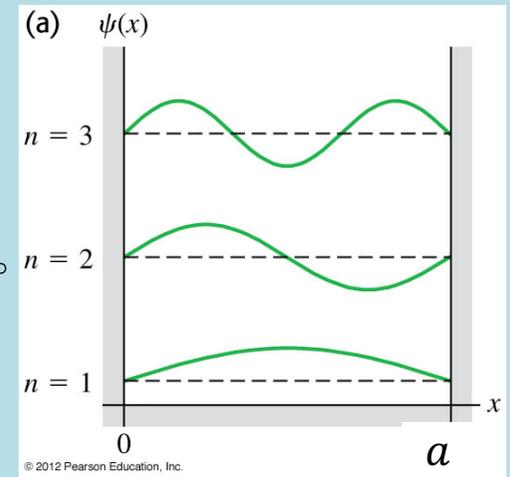


我們以無限位能井的能量本徵函數 u_n 為例，
來介紹任意算子的本徵函數普遍具有的幾個重要性質。

無限位能井的能量本徵函數 u_n 滿足正交定理，Orthogonality。

不同本徵值的本徵函數彼此正交！正交的意思是：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n^*(x)u_m(x) = \delta_{mn}$$



$$\begin{aligned} \int_0^a dx u_n^*(x)u_m(x) &= \int_0^a dx \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi x}{a} \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a dx \left\{ \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} \right\} \\ &= \frac{\sin(n-m)\pi}{(n-m)\pi} - \frac{\sin(n+m)\pi}{(n+m)\pi} \\ &= 0 \quad \text{when } n \neq m \\ &= 1 \quad \text{when } n = m \quad \text{歸一化} \end{aligned}$$

根據傅立葉分析，滿足邊界條件的任何函數 $\psi(x)$ ，

都可以分解為正弦函數、也就是 u_n 的疊加！ 展開定理Expansion Theorem

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$$

此展開神似向量以基底展開，讓我們沿用向量語言，把展開係數 c_n 稱為分量。分量 c_n 可以利用 u_n 彼此正交的特性計算出來：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n^*(x) \psi(x) = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) \left[\sum_{m=1}^{\infty} c_m u_m(x) \right]$$

代入 ψ 的展開。

$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) u_m(x) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \delta_{mn} = c_n$$

$$c_n = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) \psi(x)$$

任何可行的狀態函數，都可以展開成能量的本徵函數 u_n 的疊加！

如同傅立葉分析，展開的分量 c_n 就包含原來狀態函數 $\psi(x)$ 的所有資訊！

一系列能量的本徵函數 u_n 滿足：

展開定理：任一狀態 ψ 可以 u_n 作展開。展開讓我們聯想到向量以基底展開：

$$\psi(x) = \sum_n [c_n \cdot u_n(x)]$$



$$\vec{a} = \sum_{m=1}^l a_m \hat{i}_m$$

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn}$$



$$\hat{i}_m \cdot \hat{i}_n = \delta_{mn}$$

分量 c_a 可以寫成態函數與本徵函數的空間積分：

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x)$$



$$a_m = \vec{a} \cdot \hat{i}_m$$

把狀態視為向量，展開與正交定理，就如同向量空間的向量分析一模一樣！

能量的本徵函數 u_n 形成一組完整的基底。

任一狀態函數可以此基底作展開，疊加係數 c_n 就如同向量對一組基底的分量。

一系列能量的本徵函數 u_n 滿足：

展開定理：任一狀態 ψ 可以 u_n 作展開。展開讓我們聯想到向量以基底展開：

$$\psi(x) = \sum_n [c_n \cdot u_n(x)]$$



$$\vec{a} = \sum_{m=1}^l a_m \hat{i}_m$$

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn}$$



$$\hat{i}_m \cdot \hat{i}_n = \delta_{mn}$$

分量 c_n 可以寫成態函數與本徵函數的空間積分：

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x)$$



$$a_m = \vec{a} \cdot \hat{i}_m$$

在這對應中，最關鍵的是：我們熟悉的積分，在這向量空間內就是內積：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)^* \cdot \phi(x)$$



$$\vec{a} \cdot \vec{b}$$



這一展開式提供對無限大位能井位能下薛丁格波方程式的普遍解法：

將 $t = 0$ 時的波函數，即起始條件，對定態解 u_n 展開如下：

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) \quad \text{根據展開定理，這永遠可以做到！}$$

$t = 0$ 時此狀態可以視為定態 u_n 的如上疊加，

接著定態隨時間個自演化，位能下薛丁格方程式要求 u_n 乘上 $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ 。

乘完之後依同樣方式疊加，整個波函數也就滿足薛丁格波方程式。

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

我們已經在自由薛丁格方程式用了這樣的策略！當時的正弦波就是定態。

很明顯，這個程序不只適用於無限大位能井，原則上適用於任何位能。

兩端固定的弦的任一起始條件可以用駐波模式來疊加：例如下圖：



$$\Psi(x, 0) = \sin \frac{\pi}{a} x - \frac{1}{9} \sin \frac{3\pi}{a} x + \dots$$

如果這是波函數的起始條件 $\Psi(x, 0)$ ，它可以同樣以 $u_n(x)$ 展開。



各個定態就會各自演化後再疊加。

$$\Psi(x, t) \sim \sin \frac{\pi}{a} x e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} - \frac{1}{9} \sin \frac{3\pi}{a} x e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} + \dots$$

EXAMPLE 3-5

Consider a particle in a box. Its wave function is given by

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A(x/a) & 0 < x < a/2 \\ &= A(1 - x/a) & a/2 < x < a\end{aligned}$$

where $A = \sqrt{12/a}$ so as to satisfy $\int_0^a dx |\psi(x)|^2 = 1$. Calculate the probability that a measurement of the energy yields the eigenvalue E_n .

SOLUTION We want to calculate A_n in the expansion

$$\begin{aligned}A_n &= \int_0^a dx \psi(x) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \\ &= \frac{\sqrt{24}}{a} \left[\int_0^{a/2} dx \left(\frac{x}{a}\right) \sin \frac{n\pi x}{a} + \int_{a/2}^a dx \left(1 - \frac{x}{a}\right) \sin \frac{n\pi x}{a} \right]\end{aligned}$$

With the change of variables $\pi x/a = u$ in the first integral and $\pi x/a = \pi - u$ in the second integral, we get

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{\pi} \int_0^{\pi/2} du \frac{u}{\pi} \sin nu (1 - (-1)^n)$$

The A_n for n even vanish because of the last factor. The integral is easily calculated, and we get, for n odd only,

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{\pi} 2 \frac{1}{\pi n^2} (-1)^{n+1}$$

$$c_n \sim \frac{1}{n^2}$$

so that

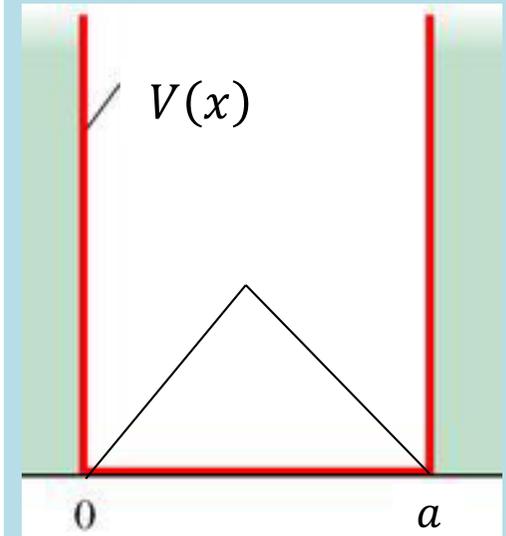
$$\begin{aligned}|A_n|^2 &= \frac{96}{\pi^4 n^4} & \text{for } n \text{ odd} \\ &= 0 & \text{for } n \text{ even}\end{aligned}$$

One can easily check, using the fact that $\sum_{\text{all}} n^{-4} = \pi^4/90$ and

$$\sum_{\text{all}} n^{-4} = \sum_{\text{even}} n^{-4} + \sum_{\text{odd}} n^{-4} = \sum_{\text{odd}} n^{-4} + (1/16) \sum_{\text{all}} n^{-4}$$

that the sum of all the probabilities is 1:

$$\frac{96}{\pi^4} \sum_{\text{odd}} n^{-4} = \frac{96}{\pi^4} \left(1 - \frac{1}{16}\right) \sum_{\text{all}} n^{-4} = \frac{96}{\pi^4} \cdot \frac{15}{16} \cdot \frac{\pi^4}{90} = 1$$



Example 6.3. The expanding box

As a further example, let us consider the case of a particle in the symmetric well, known somehow to be in its ground state. *Very suddenly*, at $t = 0$, the walls are pulled apart symmetrically to a new width $2b$ (where $b > a$). (This is in contrast to P5.21 where slow or adiabatic changes were discussed.)

The initial wavefunction of the particle in this new well (see Fig. 6.3 for the situation at $t = 0$), defined via

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} u_1^{(+)}(x; a) = \cos(\pi x/2a)/\sqrt{a} & \text{for } |x| < a \\ 0 & \text{for } a < |x| < b \end{cases} \quad (6.52)$$

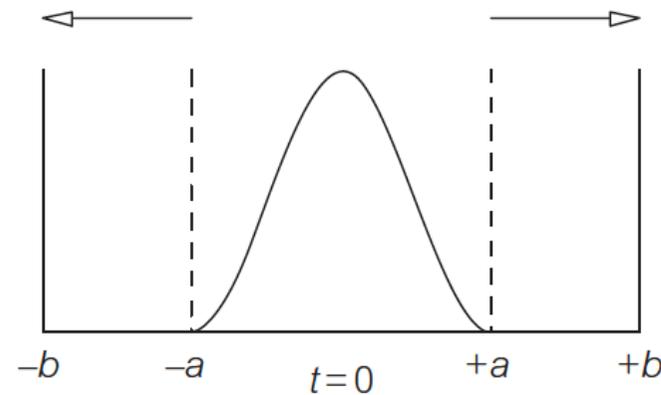


Figure 6.3. Initial state wavefunction of the "expanded well" state of Example 6.3 where the walls are suddenly moved from $\pm a$ to $\pm b$.

我們可以利用計算在此狀態 ψ 下能量的期望值來驗證以上猜測！

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{H} \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{H} \cdot \sum_n [c_n u_n(x)]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&= \sum_n E_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) u_n(x) \\ &= \sum_n E_n c_n c_n^* = \sum_n E_n \cdot |c_n|^2\end{aligned}$$

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n \cdot |c_n|^2$$

$$\psi(x) = \sum_a c_n \cdot u_n(x)$$

$$\hat{H} u_n(x) = E_n u_n(x)$$

$$c_n = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) \psi(x)$$

可見 $|c_n|^2$ 就是測量能量時，得到結果是 E_n 的機率！

波函數沿本徵函數 u_n 的展開分量 c_n ，就是對 \hat{H} 測量得到結果是 E_n 的振幅。

Measurement Theorem 測量定理

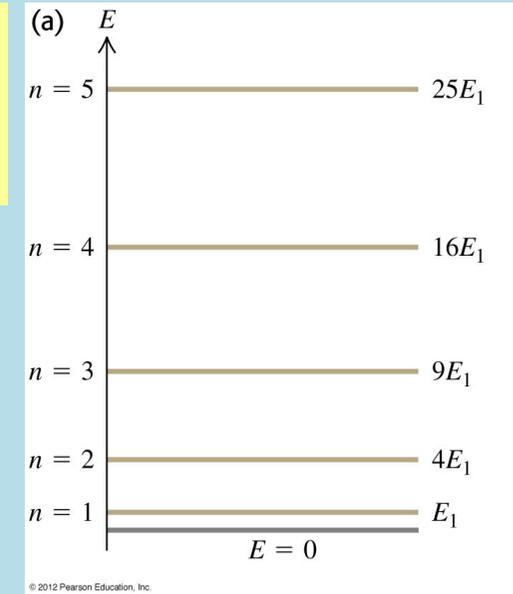
這強烈暗示測量能量時，得到結果只能是 E_n 其中之一！不會測到其他的值。

如果真是如此，機率總和必須等於1！

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \sum_n [c_n u_n(x)]$$

$$= \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) u_n(x) = \sum_n c_n c_n^* = \sum_n |c_n|^2$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$



To interpret $|A_n|^2$, we note that an energy measurement can only yield one of the eigenvalues. This statement was implicit in the starting point of Bohr's description of the stationary states of the atom. We shall take it to be a postulate of quantum mechanics that a measurement of the energy must be one of the eigenvalues of the energy operator. Under

沒有遺漏，可見對能量的測量結果只能是本徵值 E_n 其中之一，不能是其他的值。

如果還會測到其他值，總機率就要超過1了！

到此，無限大位能井內的電子，不一定是在定態，能量的量子化完全確立！

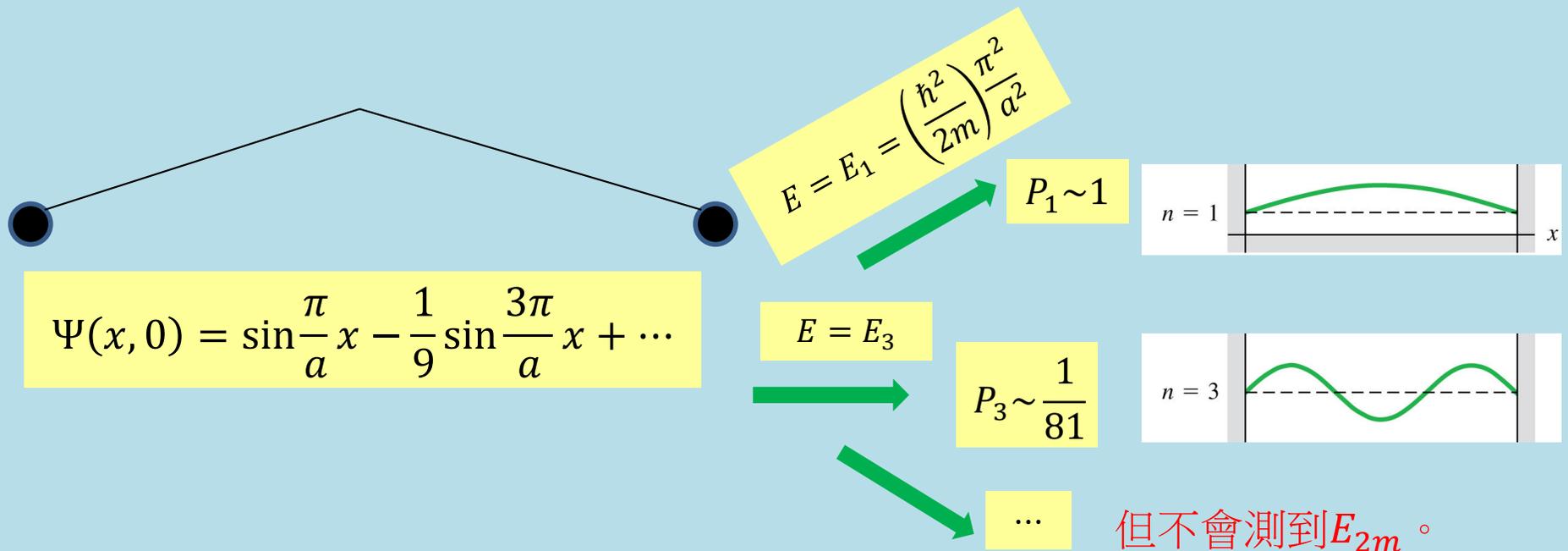
對任一狀態 $\psi(x)$ 作能量的測量，若所得到的結果是某一 E_n ，
剛測量完時，立刻再作一次能量的測量，結果一定確定還是 E_n ，
測量結果確定的狀態就是該物理量算子的本徵態。

可見第一次剛測完時，粒子狀態應該就是本徵函數 $u_n(x)$ 。

所以第一次的測量使粒子的狀態由 $\psi(x)$ 瞬間崩潰變成了 $u_n(x)$ 。

$$\psi(x) \xrightarrow{\hat{H} \rightarrow E_n} u_n(x)$$

當然每一次測量結果不會是確定的！崩潰變成的狀態也就不確定。

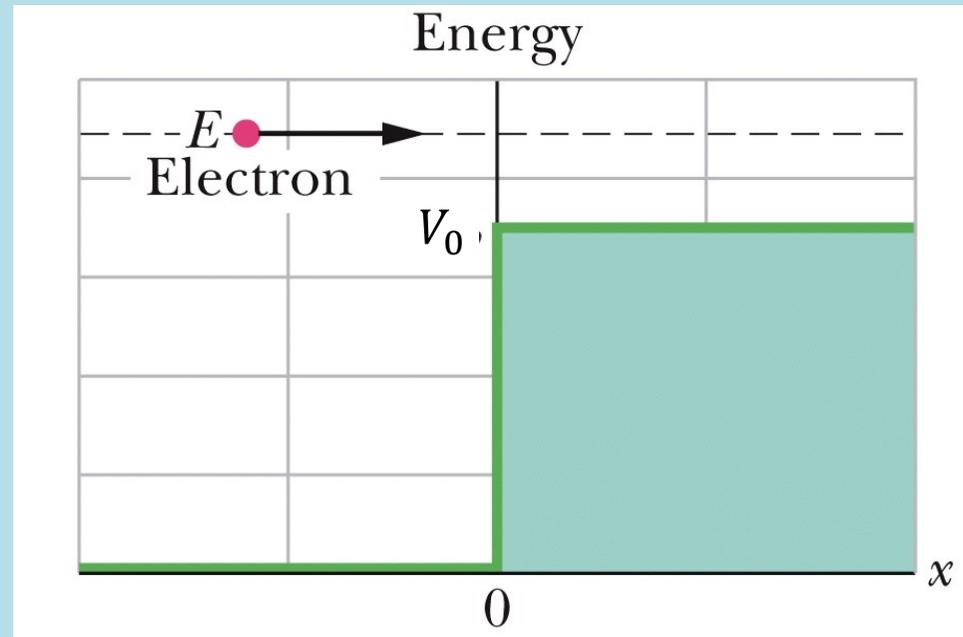


階梯狀位能散射

$$V = 0, \quad x < 0$$

$$V = V_0, \quad x > 0$$

$$E > V_0$$



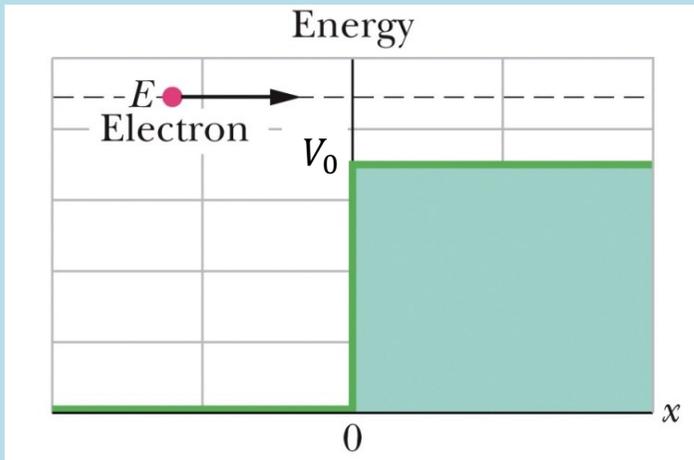
解這個位能下的定態，即能量的本徵函數。

也就是解與時間無關的薛丁格方程式。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$

反射與透射

在兩個區域內分別都是自由粒子，自由電子波定態解可以適用：



$x < 0$

$$\psi_E = Ae^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$x > 0$

$$\psi_E = Te^{iqx}$$

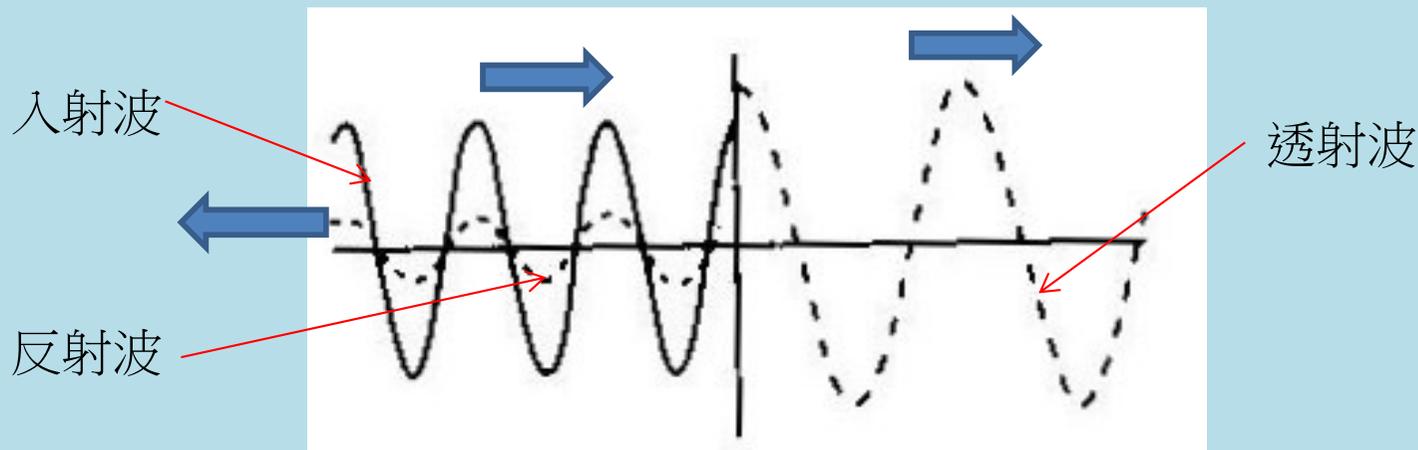
$$q \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

若只考慮由左入射的波， e^{-iqx} 的部分可忽略。

$$k > q$$

$$\lambda_1 < \lambda_2$$

由左向右入射的正弦波，在邊境產生向右的透射波，及向左的反射波。



由左向右入射的波，嚴格應該用波包處理，

但我們先以自由電子波 e^{ikx} 近似，所以就取 $A = 1$ 。

之後可將此定態解乘高斯分布的 k 進行疊加，那入射部分就真的是波包了。

$$x < 0 \quad \psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$\psi' = ik e^{ikx} - ik R e^{-ikx}$$

$$x > 0 \quad \psi_E = T e^{iqx}$$

$$\psi' = iq T e^{iqx}$$

ψ 及 ψ' 在邊界原點連續，可以得到兩個連續條件，正好求解得 R, T 。

$$1 + R = T$$

$$k - kR = qT$$

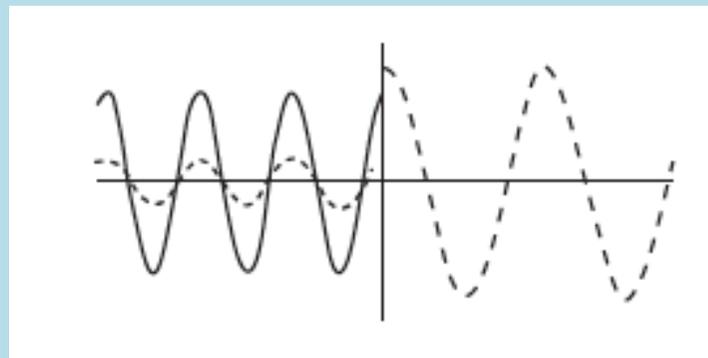
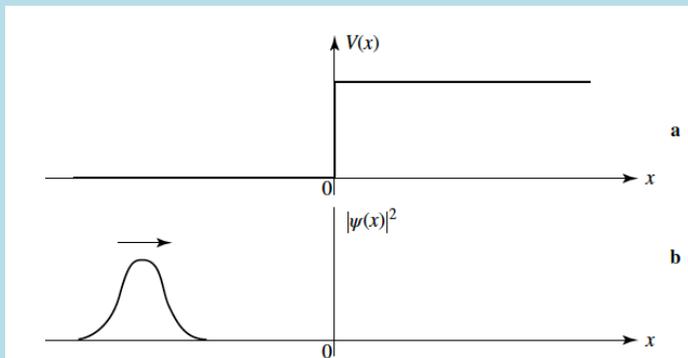


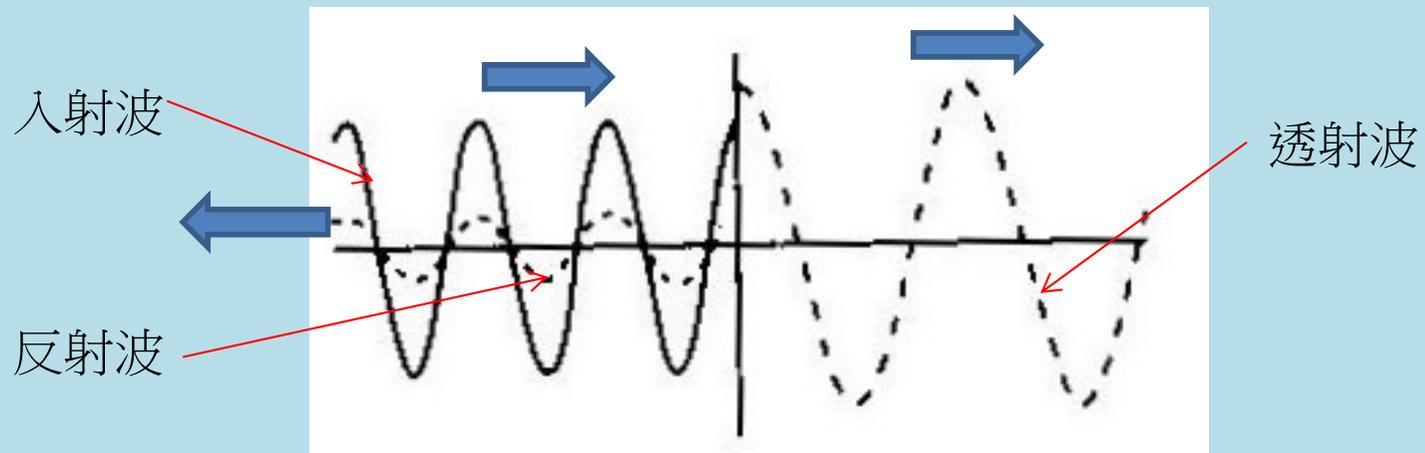
$$R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$T = \frac{2k}{k + q}$$

$$k > q, T > 1$$

R 決定了反射波強度， T 決定了透射波強度。



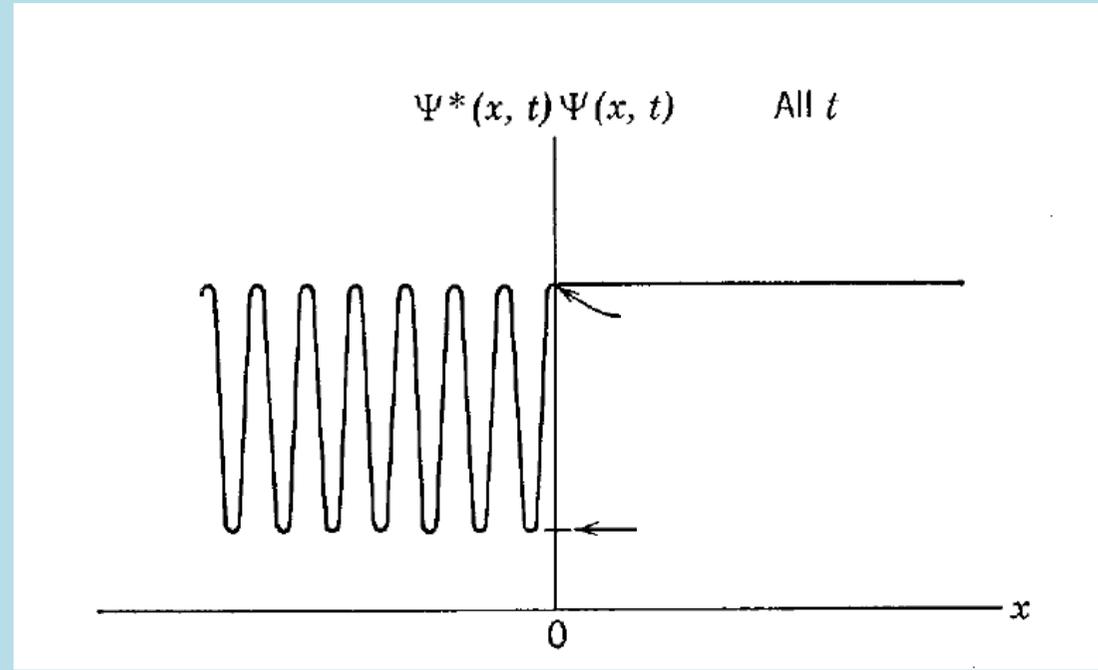
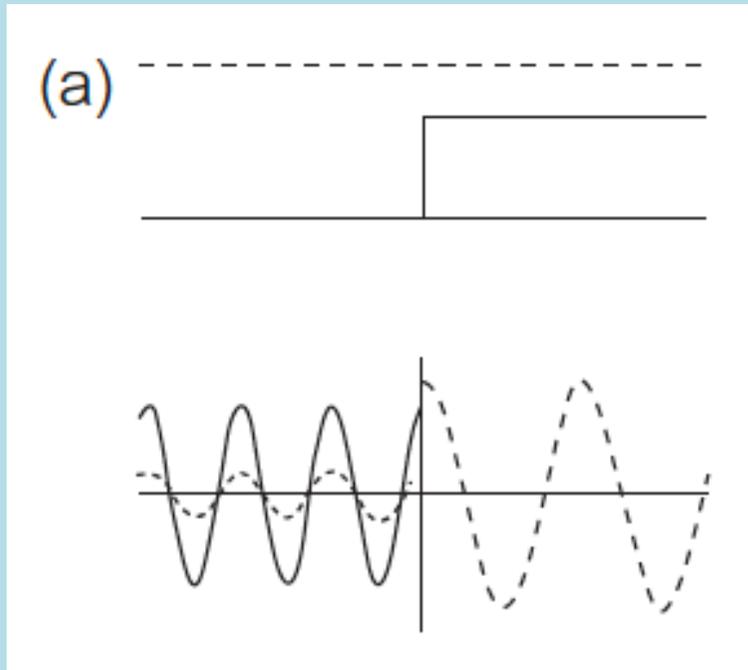


我們得到的定態解，乘上時間演化就是完整的波函數：

$$\Psi_k(x, t) = \begin{cases} e^{i(kx - Et/\hbar)} + R e^{-i(kx + Et/\hbar)} & x < 0 \\ T e^{i(qx - Et/\hbar)} & x > 0 \end{cases}$$

入射波的相位會向右傳播，透射波也向右，反射波的相位向左傳播。

機率分布



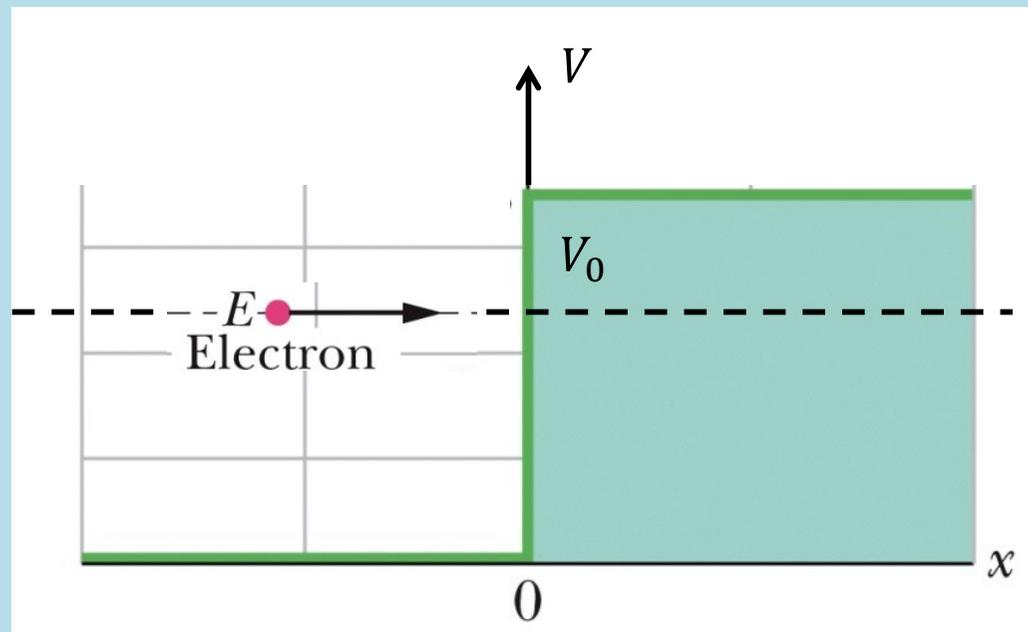
反射的波與入射波疊加干涉！機率分布與位置有關。
但機率總和是無限大，以上的解並不能歸一化。

階梯狀位能全反射

$$V = 0, \quad x < 0$$

$$V = V_0, \quad x > 0$$

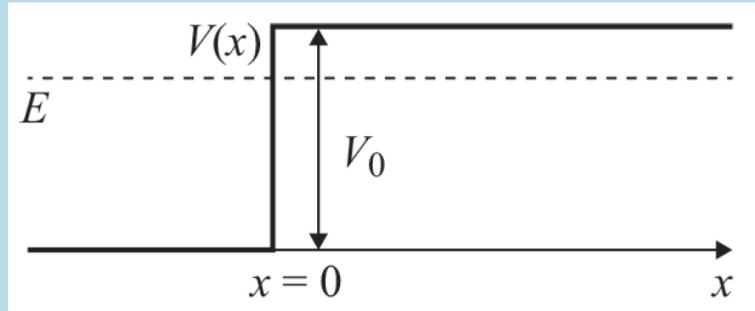
如果 $E < V_0$



$$x < 0$$

$$\psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



$$x > 0$$

$$E < V_0$$

古典粒子不能存在這樣的區域

但與時間無關的薛丁格方程式依舊有解：

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \kappa^2\psi_E \quad , \quad -E\psi_E \equiv \kappa^2\psi_E$$

$$\kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

$$\psi_E = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$$

在量子力學中，波函數還是有解，只是不再是正弦波，而是指數函數。

波函數若向右隨 x 增加，則在無限遠處波函數發散，不可能，因此 $D = 0$ 。

$$\psi_E = Te^{-\kappa x}$$

進入折返點內禁止區後，振幅會指數遞減！

$$\psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad x < 0$$

$$\psi_E = Te^{-\kappa x} \quad x > 0$$

同樣要求 ψ 及 ψ' 在邊界原點連續，

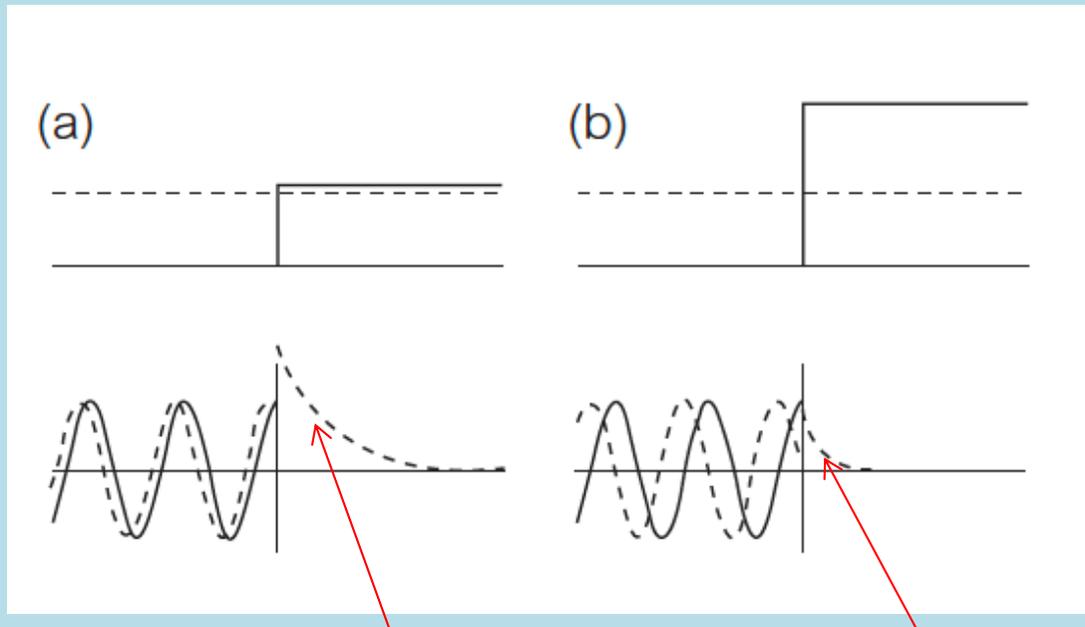
$$1 + R = T$$

$$k - kR = i\kappa T$$

與之前式子相同，只要以 $i\kappa$ 替代 q 即可！

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}$$

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa}$$



$$P = |\Psi|^2 = \left| \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi_E(x)|^2 \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi_E(x)|^2 = |T|^2 e^{-2\kappa x}$$

在禁止區，機率密度不再是常數，而是隨滲透距離 x 指數遞減了！

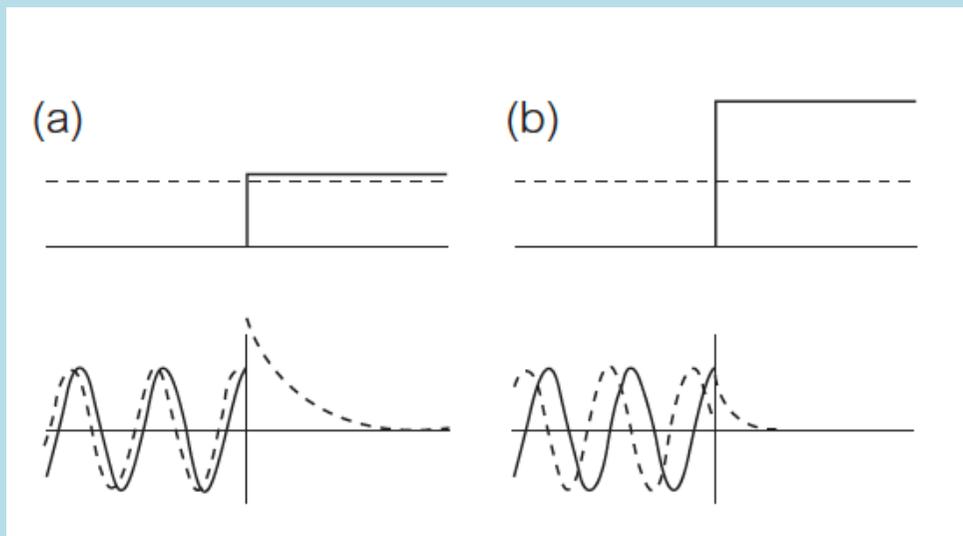


Figure 11.4. Same as for Fig. 11.3, but for two cases where $V_0 > E > 0$.

$$k - i\kappa \equiv |k - i\kappa|e^{-i\delta}$$

$$\frac{\kappa}{k} = \tan \delta$$

$$k + i\kappa = |k + i\kappa|e^{i\delta}$$

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right| e^{-2i\delta} = e^{-2i\delta}$$

反射波與入射波振幅相同，但相差一個相角 2δ ！ δ 由 E 決定。

$$\psi_E = e^{ikx} + R e^{-ikx} = e^{ikx} + e^{-i(kx+2\delta)}$$

$$|R|^2 = |e^{-2i\delta}|^2 = 1 \quad \text{反射率為1，完全反射。透射率是零。}$$

在禁止區，雖然有滲透機率，可算出機率流為零，並沒有機率流進去！

$$j = -i \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \cdot \psi - \psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

對實數的 ψ ，兩項抵消， $j = 0$ 。

$$E = 0.5V_0$$

$$\delta = \frac{\pi}{4}$$

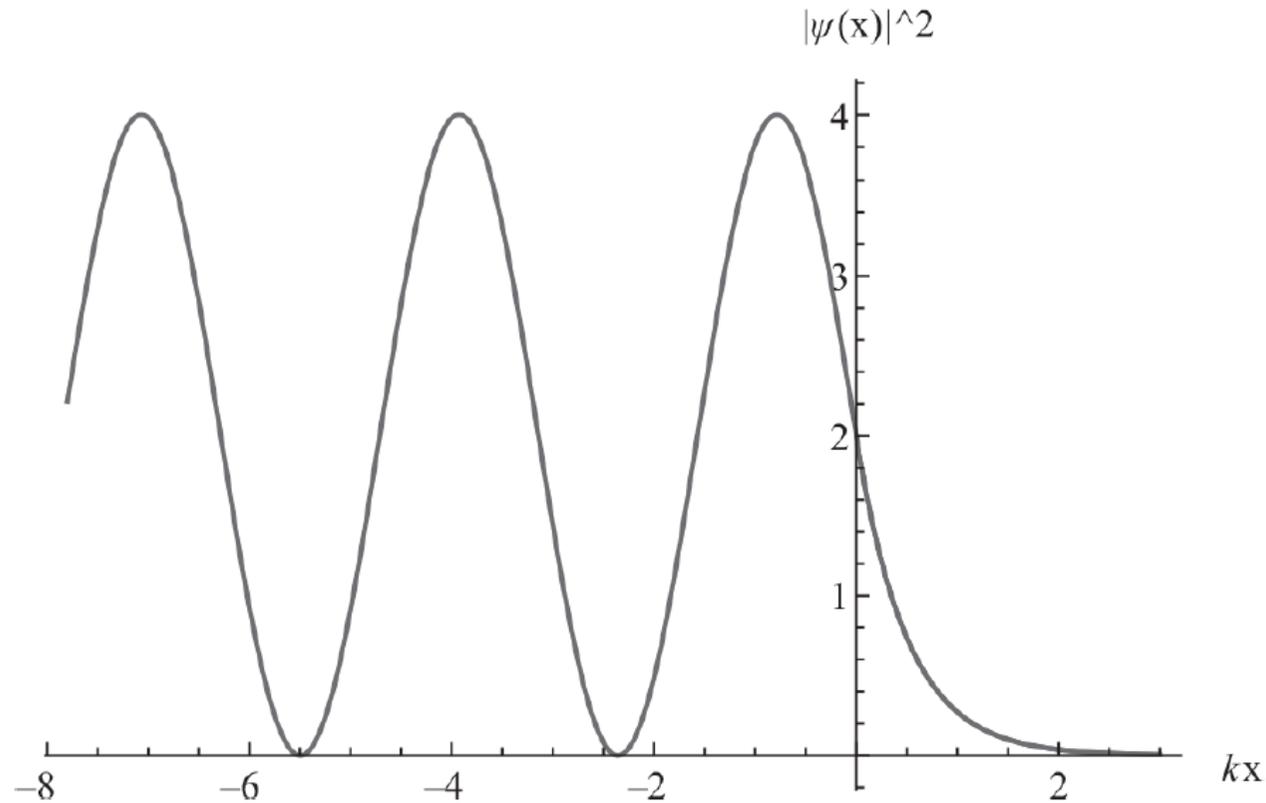
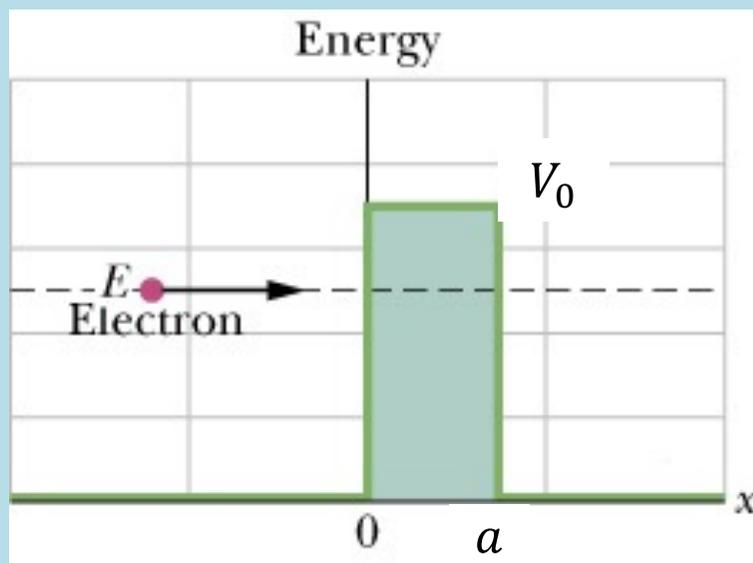


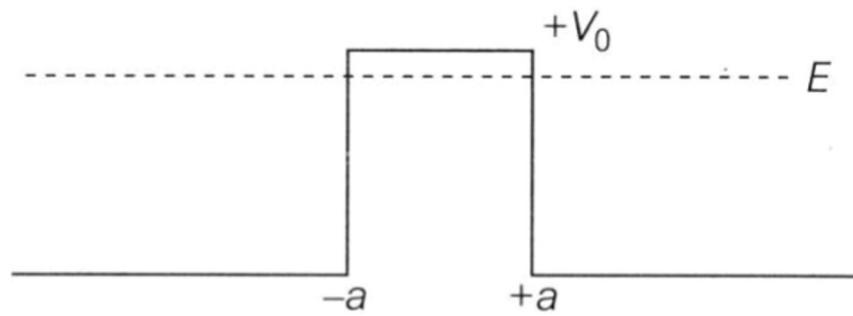
Figure 8.6

Probability density $|\psi(x)|^2$ as a function of position for an energy eigenstate with $E = \frac{1}{2}V_0$, giving $\delta(E) = \frac{\pi}{4}$ and $k = \kappa$, and setting $A = 1$ in (8.1.32). The value of $|\psi(0)|$ (equal to $\sqrt{2}$ here) is nonzero for arbitrary phase shift $\delta(E)$. The probability density decays exponentially for $x > 0$.

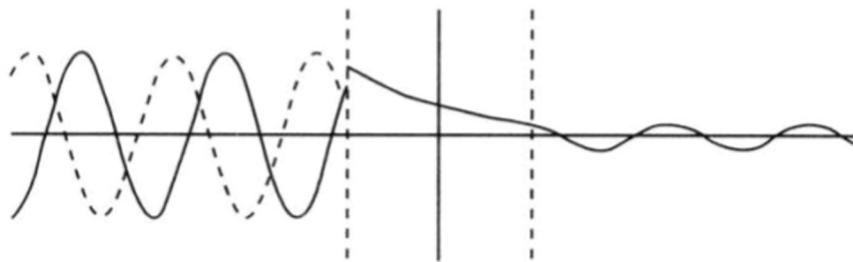
穿隧效應 Tunneling Effect

在禁止區，雖然有滲透機率，可算出機率流為零，並沒有機率流進去！
但如果這位能只持續很小一個範圍，位能很薄，粒子便能滲透過去，
在位能壘後方形成一個自由粒子波！





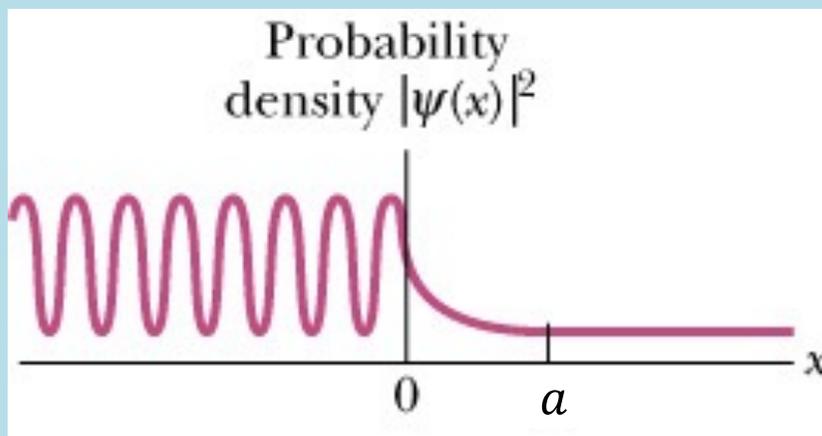
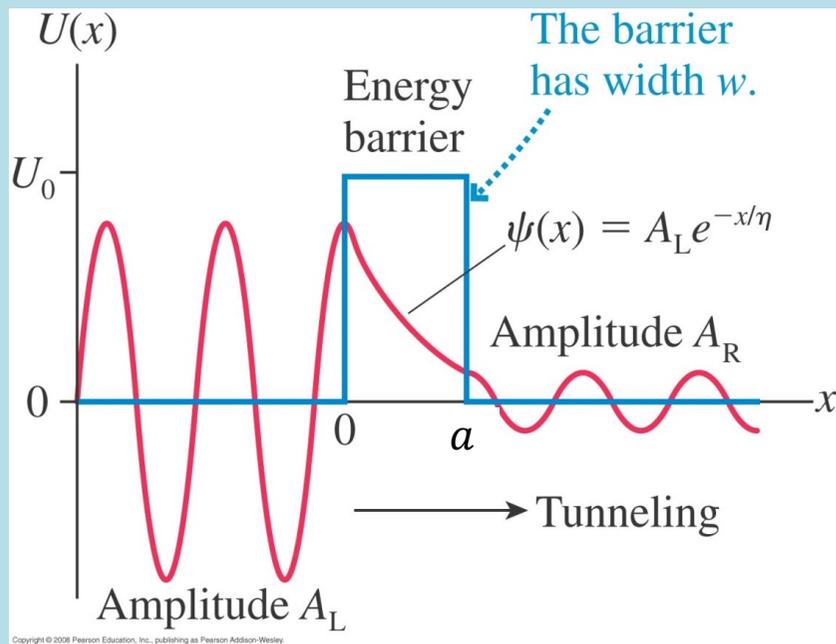
Particle tunnels
through barrier



..... Incident
----- Reflected

— Transmitted

Tunneling effect 穿隧效應



在位壘中

$$\psi_E(x) \sim A e^{-\kappa x}$$

機率密度

$$P = |\psi_E|^2 = |A|^2 e^{-2\kappa x}$$

隨距離而指數遞減。在 $x = a$ ， ψ_E 要連續。

穿透後 $x > a$ 機率

$$\sim |\psi_E(a)|^2 \propto e^{-2\kappa a}$$

一個電子有這麼多的機率會穿透，其餘的機率則反彈回來！

$$\kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

能量差距越小， κ 越小，穿透率越大！

比較嚴格的計算

$$x < 0$$

$$\psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

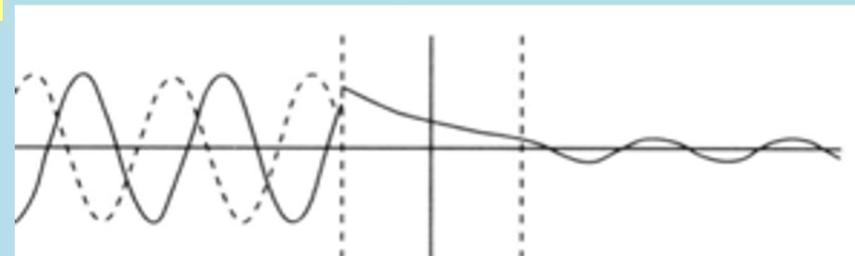
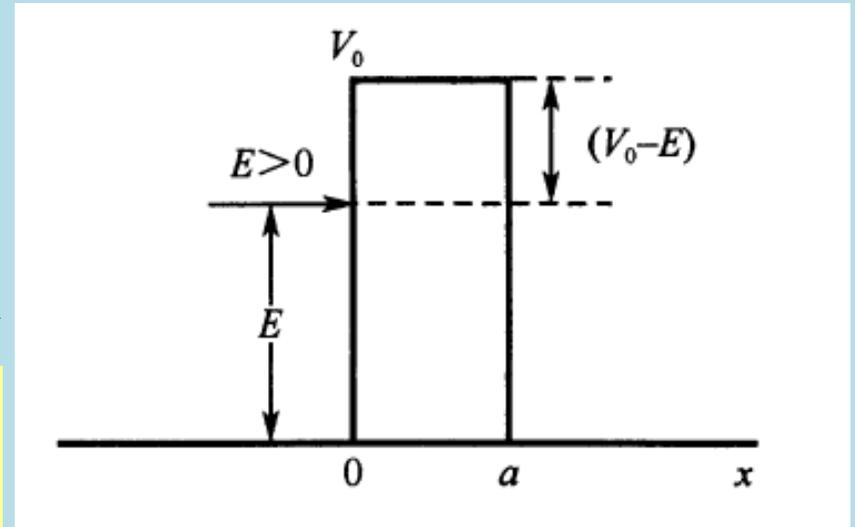
$0 < x < a$ 在位壘中，指數遞增也要列入

$$\psi_E = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$$

$$\kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

$$x > a$$

$$\psi_E = Se^{ikx}$$



ψ 與 ψ' 在兩邊界都要連續，

$$1 + R = A + B$$

$$\frac{ik}{-\kappa}(1 - R) = A - B$$

$$x = 0$$

$$Se^{ika} = Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a}$$

$$\frac{ik}{-\kappa}(Se^{ika}) = Ae^{-\kappa a} - Be^{\kappa a}$$

$$x = a$$

估算. 设 $\kappa a \gg 1$, 此时 $\text{sh}\kappa a \approx \frac{1}{2}e^{\kappa a} \gg 1$, 式(3.3.16)可近似表示成

$$|S|^2 \sim \left(\frac{4\kappa k}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 e^{-2\kappa a}$$

$$\begin{aligned} |S|^2 &: \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a} \\ &= \frac{16E(V_0 - E)}{V_0} \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right] \end{aligned}$$

(3.3.19)

可以看出 T 与势垒宽度 a , $(V_0 - E)$, 以及粒子质量 m 的依赖关系都很敏感. 随势垒宽度 a 和粒子质量 m 增大, T 将指数衰减, $T \propto e^{-a\sqrt{m}}$. 所以, 在宏观实验中, 不容易观测到粒子穿透势垒的现象.

例如, 对于电子, 设 $E = 1\text{eV}$, $V_0 = 2\text{eV}$, $a = 2 \times 10^{-8}\text{cm}$, 可以估算出 $T \approx 0.51$. 若 $a = 5 \times 10^{-8}\text{cm}$, 则 $T \approx 0.024$, 迅速变小. 若电子换成质子, 因为 $m_p/m_e \approx 1840$, $a = 2 \times 10^{-8}\text{cm}$, 可估算出 $T \approx 2.6 \times 10^{-38}$.

对于 $E > V_0$ 情况 (图 3.13), 只需在式(3.3.16)中, 把 $\kappa \rightarrow ik'$, k' 为实数

$$k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (3.3.20)$$

再利用 $\text{sh}(ik'a) = i \sin k'a$, 可得

$$\begin{aligned} |S|^2 &= \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a + 4k^2 k'^2} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right)^2 \sin^2 k'a} \quad (k' \leq k) \end{aligned} \quad (3.3.21)$$

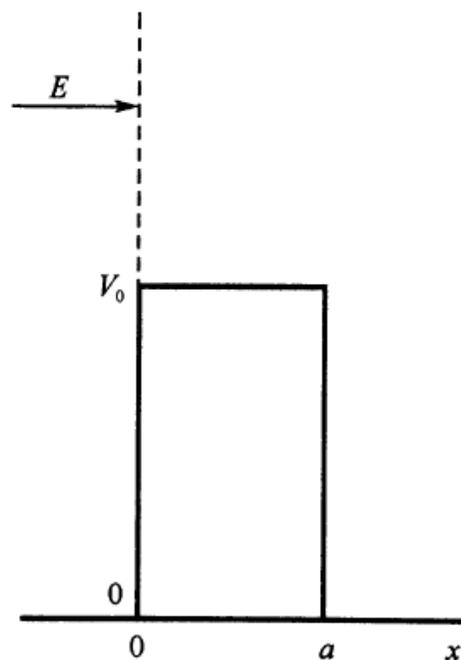


图 3.13