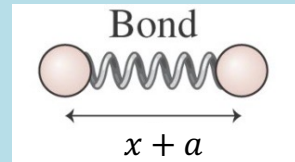


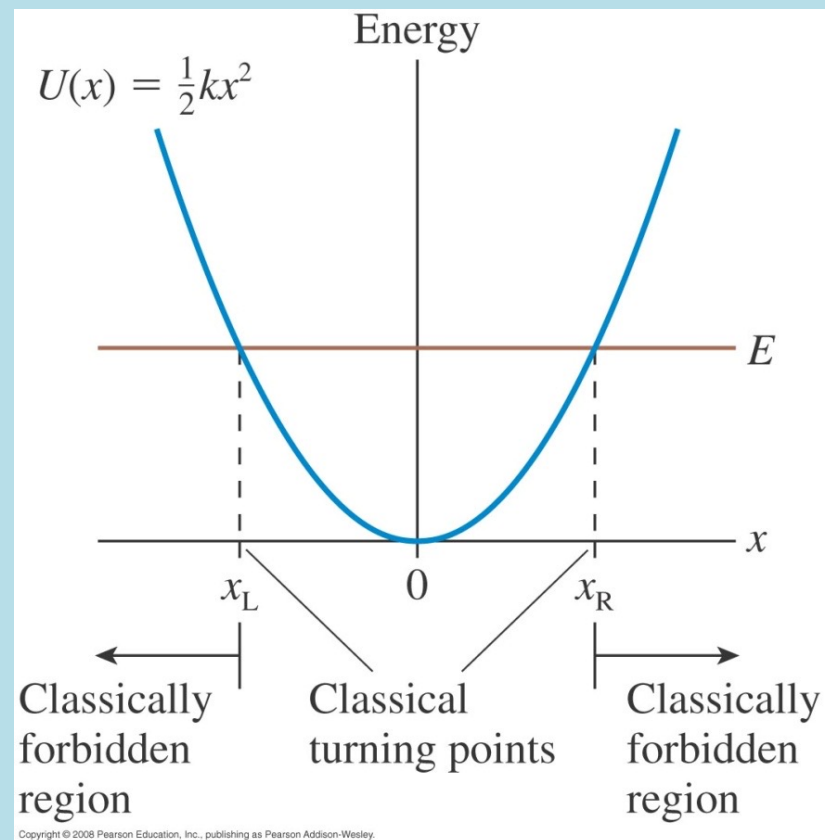
簡諧振盪器、量子彈簧、1D位能束縛態

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E}{dx^2} = \left(\frac{1}{2} kx^2 - E \right) \psi_E$$



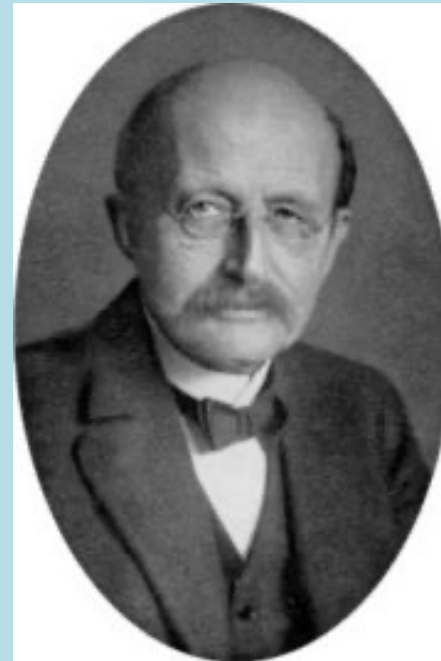
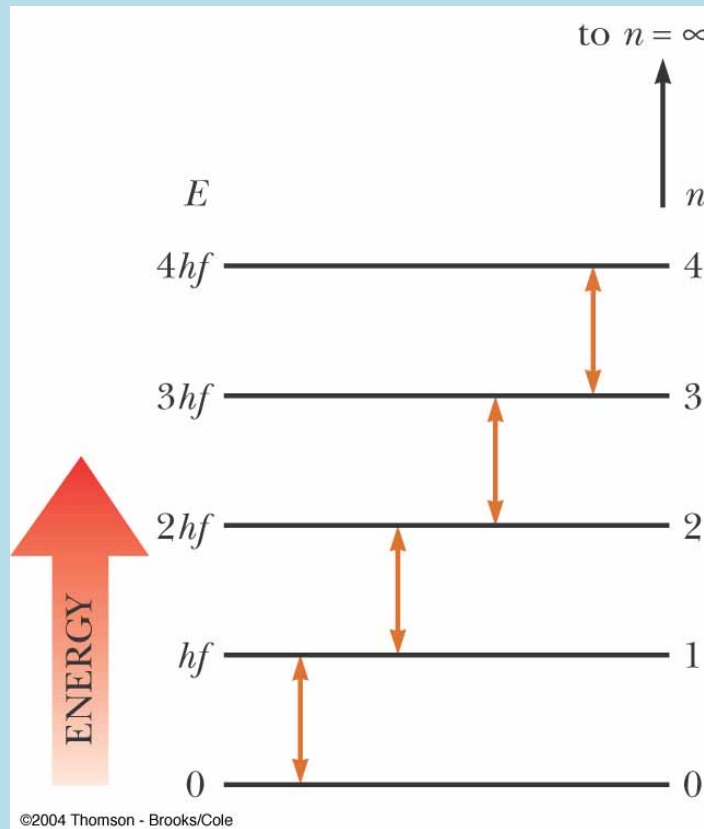
最簡單的量子彈簧就是雙原子分子！



黑體輻射以及空腔輻射也是一系列的量子彈簧。

如果要解釋黑體輻射，量子彈簧的能量變化必需是能階狀的！

Max Planck 在1900 開啟了量子革命的第一槍！



量子彈簧的能量不是連續的，而是固定量子的整數倍（離散型式）

量子(Quantum)的大小與頻率成正比！

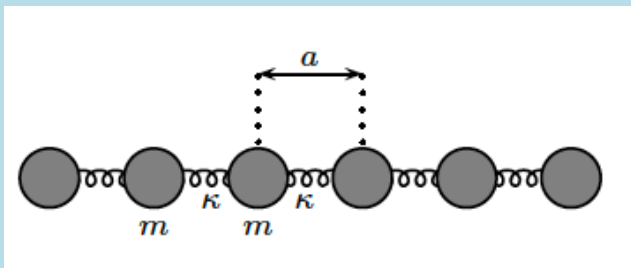
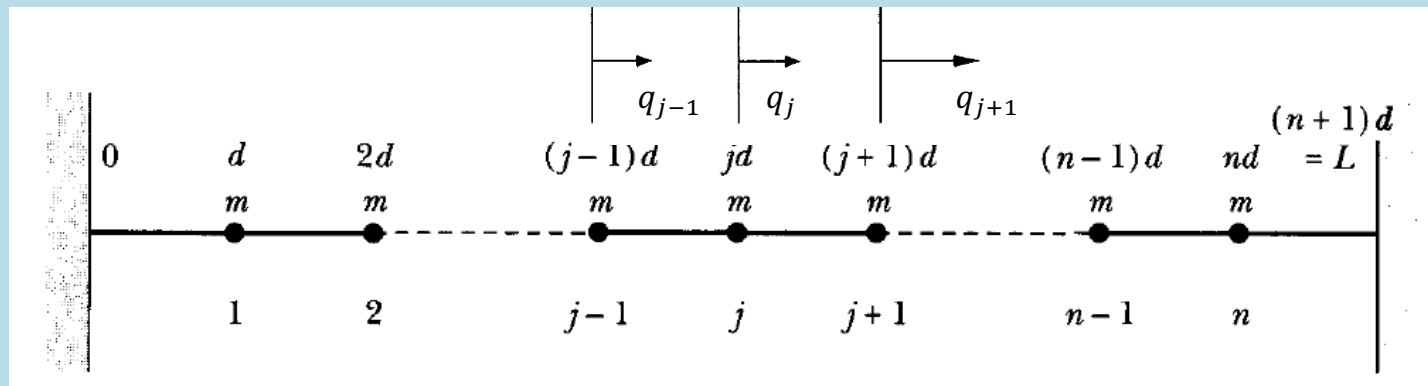
$$E_n = n \cdot hf \quad h: \text{Planck Constant}$$

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$$



12.9 The Loaded String*

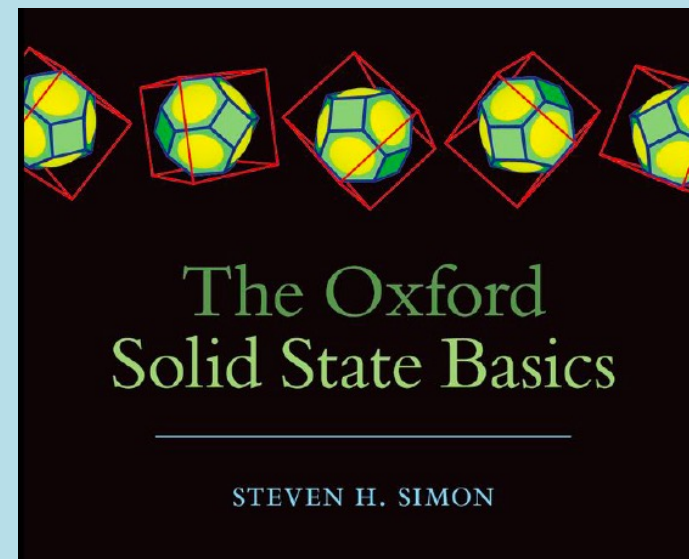
固體內原子晶格的振動也是一系列量子彈簧



Vibrations of a One-Dimensional Monatomic Chain

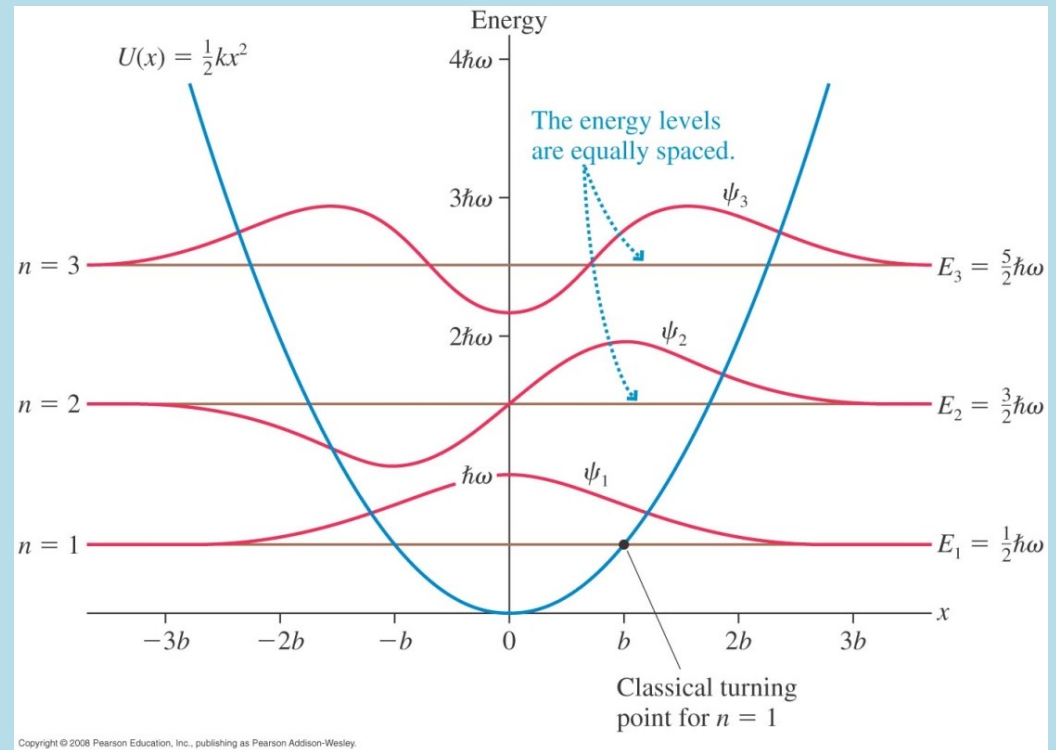
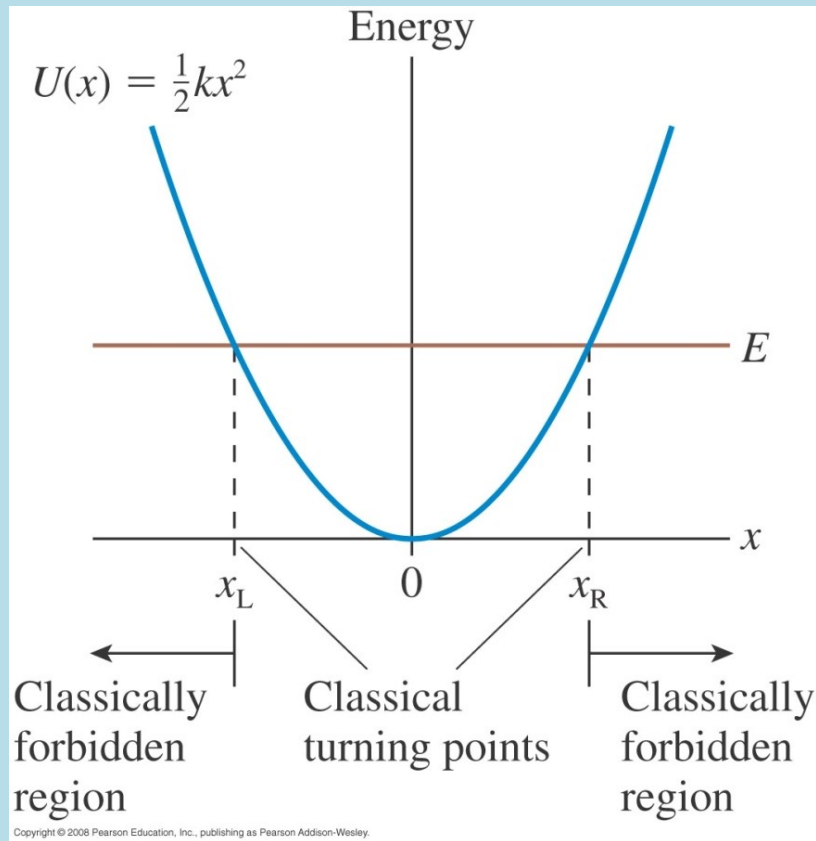
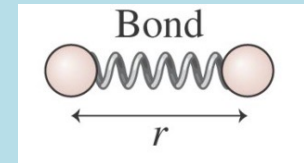
9

In Chapter 2 we considered the Boltzmann, Einstein, and Debye models of vibrations in solids. In this chapter we will consider a more detailed model of vibration in a solid, first classically, and then quantum-



量子簡諧振盪器 Simple Harmonic Oscillator SHO、量子彈簧

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} kx^2 - E \right) \psi_E$$



$$E_n = \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

波函數會進入古典禁止區域

能量是量子化的！

ANNALEN DER PHYSIK.

VIerte Folge. Band 79.

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger.*

Quantisation as an eigenvalue problem;
by E. Schrödinger*

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

1. Der Plancksche Oszillator. Die Entartungsfrage.

Wir behandeln zunächst den eindimensionalen Oszillator. Die Koordinate q sei die Elongation multipliziert mit der Quadratwurzel aus der Masse. Die beiden Formen der kinetischen Energie sind dann

$$(20) \quad \bar{T} = \frac{1}{2} \dot{q}^2, \quad T = \frac{1}{2} p^2.$$

Die potentielle Energie sei

$$(21) \quad V(q) = 2\pi^2 \nu_0^2 q^2,$$

wo ν_0 die Eigenfrequenz im Sinne der Mechanik. Dann lautet Gleichung (18) für diesen Fall:

$$(22) \quad \frac{d^2 \psi}{dq^2} + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - 2\pi^2 \nu_0^2 q^2) \psi = 0.$$

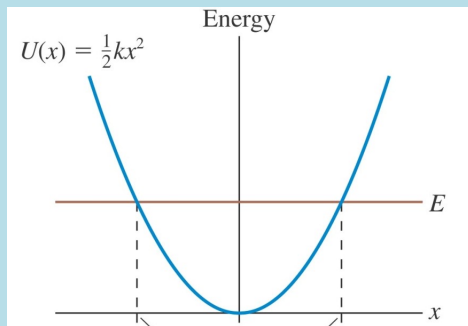
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$

先讓我們定性的來猜一下它的定態解。

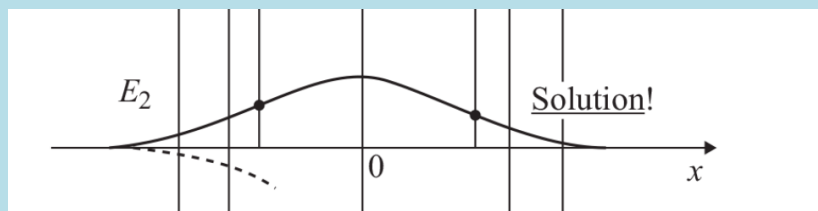


Scanned at the American Institute of Physics

彈力位能是左右對稱的，對稱點在原點： $x = 0$ 。



物理結果應該左右對稱，所以，定態方程式的解 ψ 或許也是對稱的？例如：

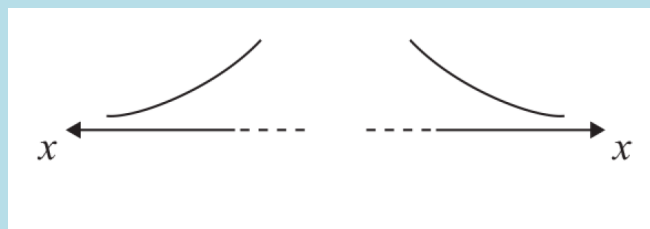


這樣的對稱的解稱為：偶函數。

偶函數在原點的斜率必須為零！斜率在原點才能連續。

在無限遠處，可以猜想到， ψ 及其斜率 ψ' 會漸漸趨近於零。

$x \rightarrow \infty, \psi, \psi' \rightarrow 0$ ，在 $x \rightarrow -\infty$ 附近，會與 $x \rightarrow \infty$ 對稱！如下：



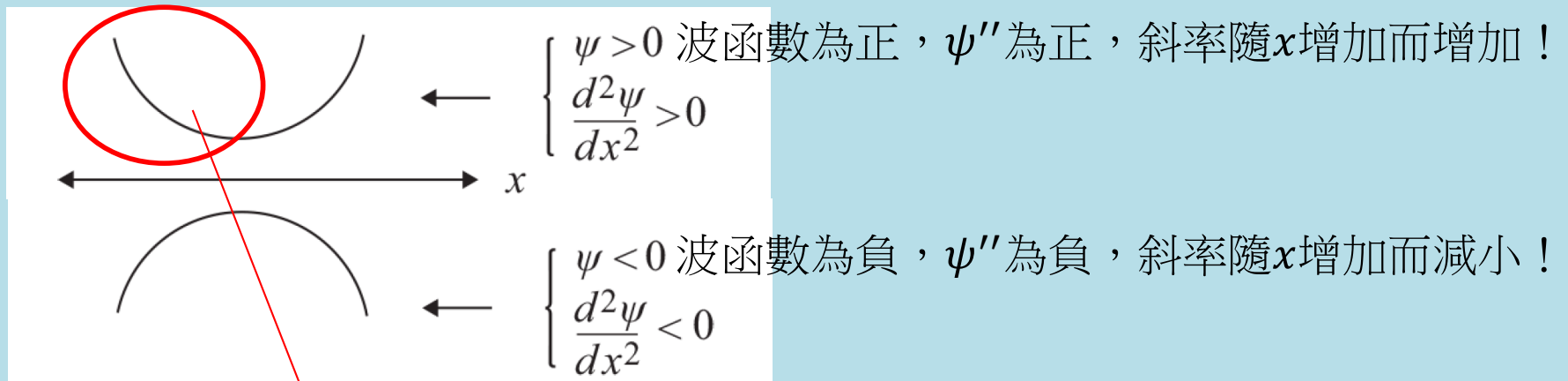
在 $x \rightarrow \pm\infty$ 兩者之間，解的變化就由方程式決定，我們也有一些定性的了解：

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

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

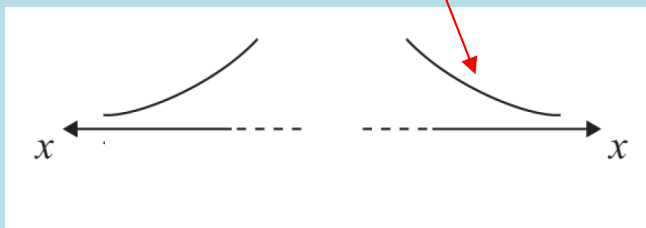
$V(x) - E$ 的正負號會決定 $\frac{\psi''}{\psi}$ 的正負號！而 ψ'' 是斜率的變化！

若 $V(x) > E$ ，這是古典不容許的區域！ $\frac{\psi''}{\psi}$ 為正。



通常就說：古典不容許的區域， x 增加時，波函數會趨離 x 軸而彎曲。

前述 $+\infty$ 處就是這樣的例子： x 增加時，負的斜率增加，傾斜度減小到零，

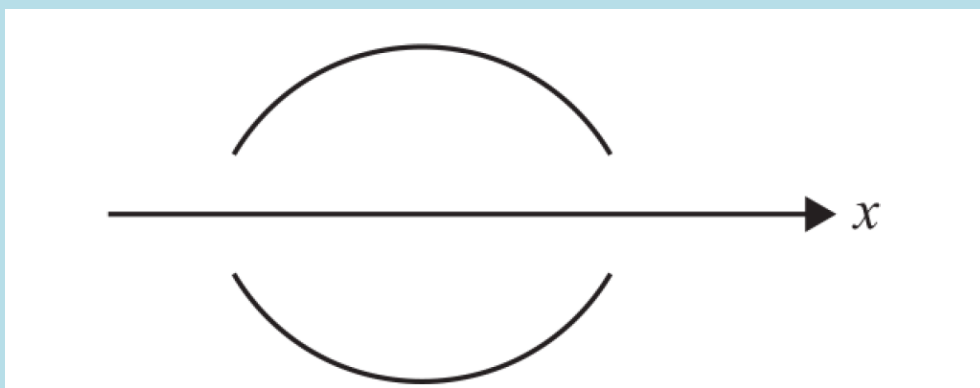


定性上類似指數遞減。

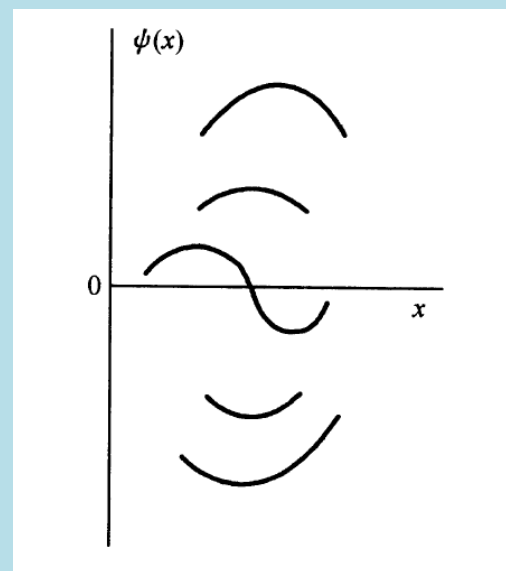
$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

$V(x) < E$ 的區域是古典容許的！ $\frac{\psi''}{\psi}$ 為負。

波函數 ψ 為正時， ψ'' 為負，斜率隨 x 增加而減小！



波函數 ψ 為負時， ψ'' 為正，斜率隨 x 增加而增加！



在古典容許的區域， x 增加時，波函數會趨向 x 軸而彎曲，直到與 x 軸相交。
穿過 x 軸後又會趨向 x 軸彎曲，再一次又穿過 x 軸，典型的情況會來回穿過 x 軸。

結論：在古典不容許的區域，定性上類似指數遞減！

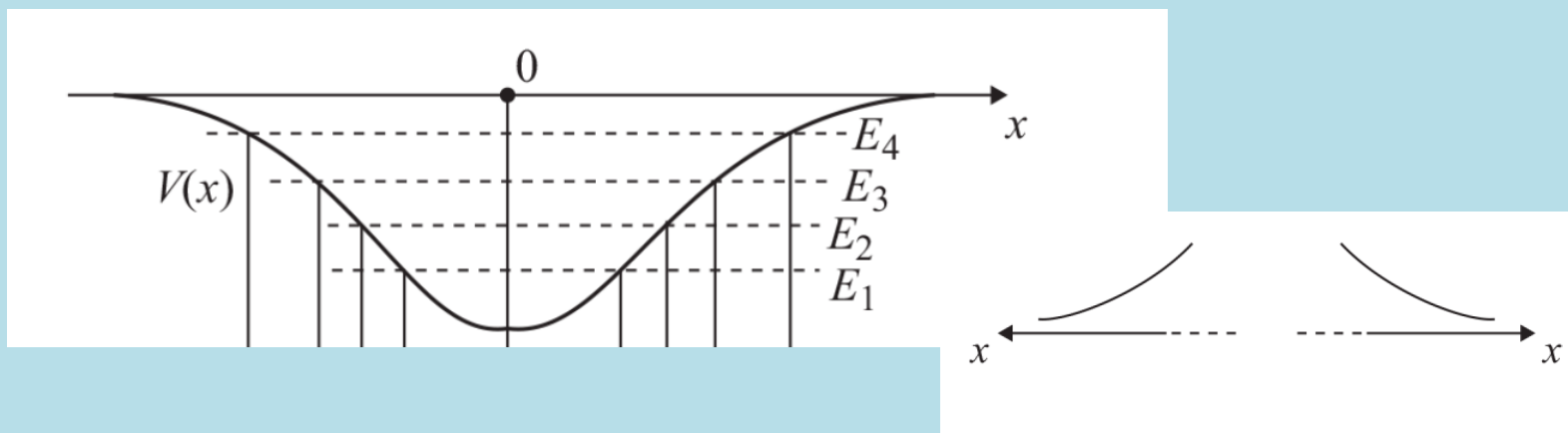
在古典容許的區域，定性上類似來回振盪！

策略：考慮一系列的能值，大小不同，因此折返點不同。

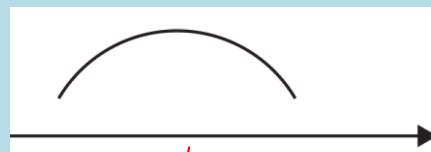
已知當 $x \rightarrow \infty$ ，波函數解 ψ 及其斜率 ψ' 會趨近於零。

從 $x \rightarrow \infty$ 出發向內朝原點前進，以斜率變化 ψ'' 的正負，定性得到函數的行為。

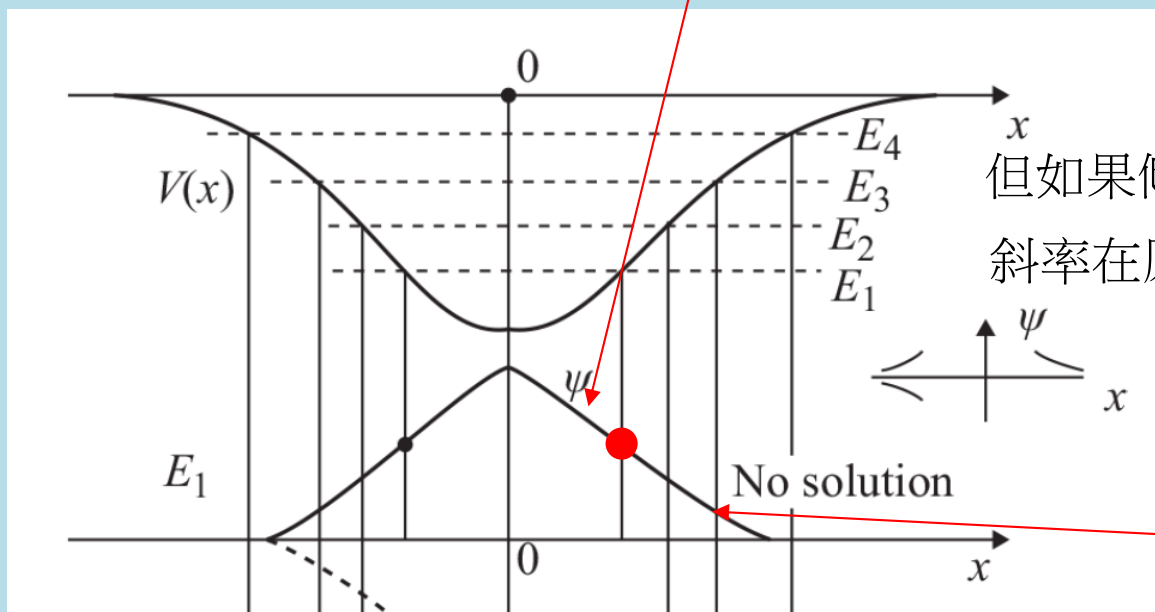
而當地 $V(x) - E$ 的正負號，也就是是否為古典容許區域，會決定 $\frac{\psi''}{\psi}$ 的正負號！



對於 E_1 ：

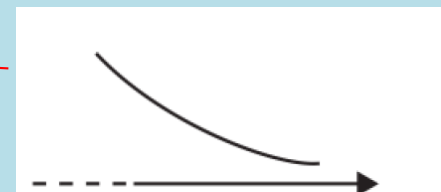


在折返點內，曲線趨向 x 軸彎曲。
向原點靠近時，傾斜度開始漸漸下降！

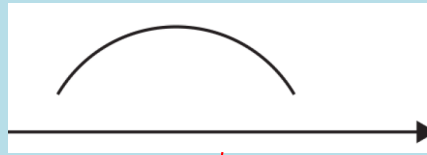


但如果傾斜度到達原點，來不及降為零！
斜率在原點就無法連續，此解不成立！

如圖，對於 E_1 ，沒有解！



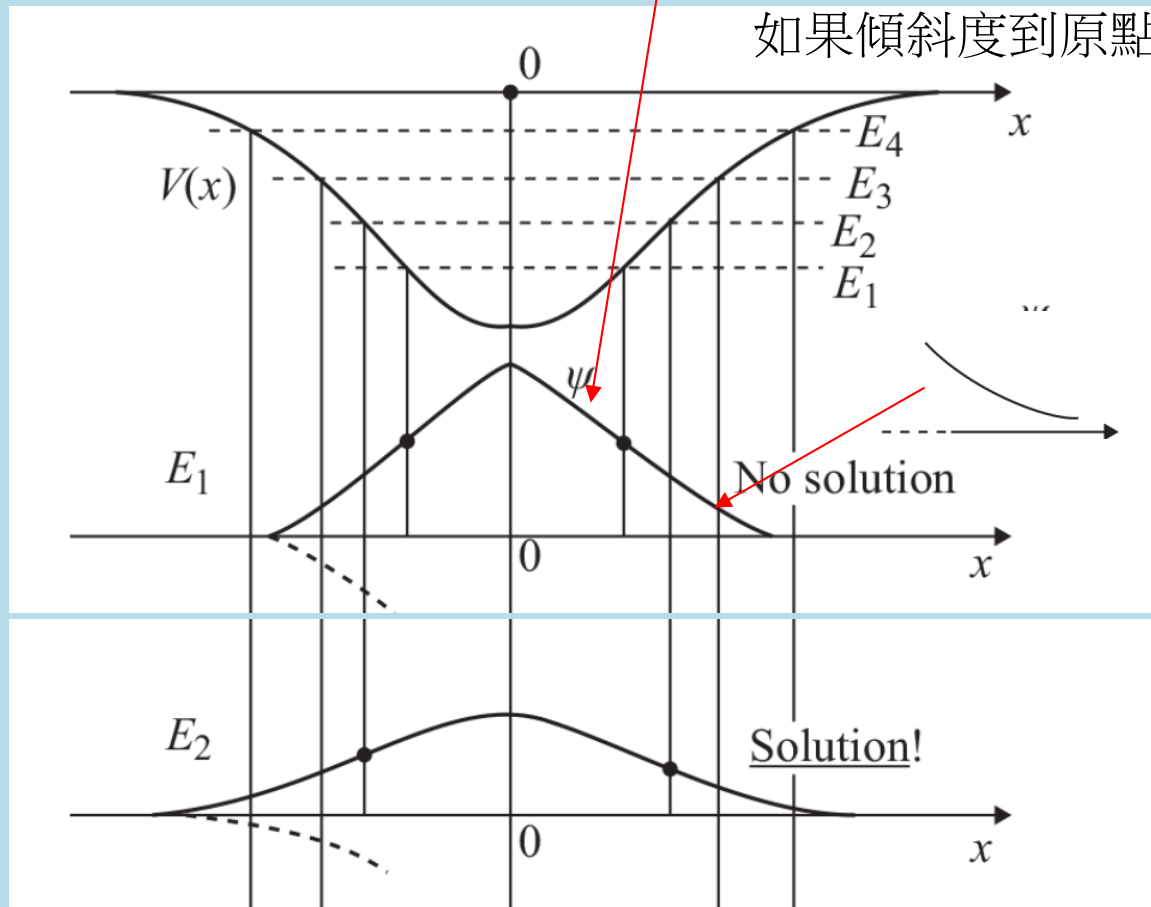
折返點外，從無限遠傾斜度為零，這是古典不容許的區域， $\frac{\psi''}{\psi}$ 為正。
往內走，負的斜率繼續減小。傾斜度增加。



由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！

到折返點後，傾斜度又漸漸減小。

如果傾斜度到原點，來不及降為零，解不成立。



對於 E_2 ，折返點右移！

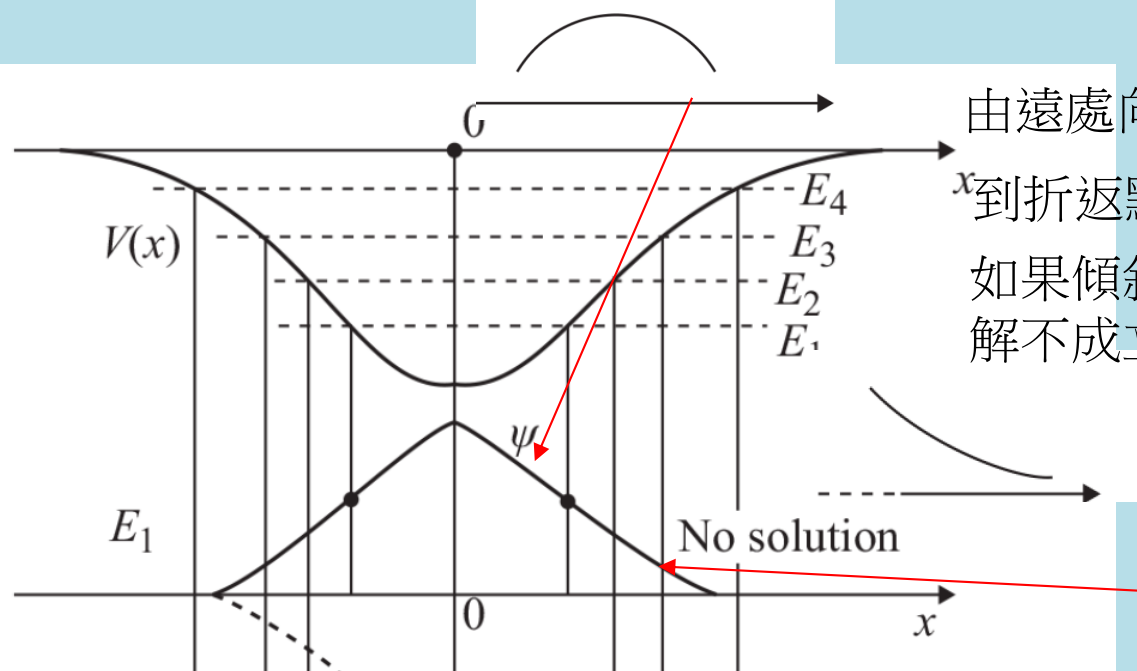
傾斜度有較大間隔下降！

傾斜度在原點恰好降為零！

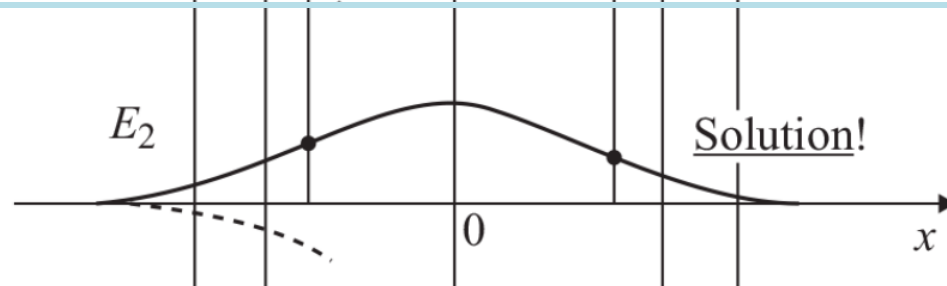
$E = E_2$ ，定態方程式有解！

所以條件必須剛好成立，定態方程式才会有解！

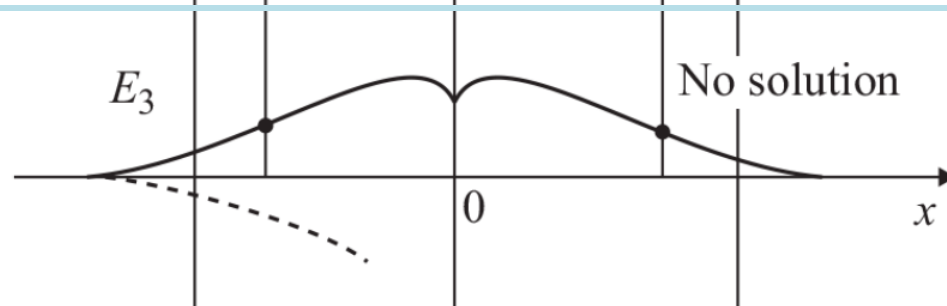
能量必須恰好使得傾斜度在 ∞ 由零加大，在折返點開始減小，到原點恰好減到零！



由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！
 x 到折返點後，傾斜度又漸漸減小。
 如果傾斜度到原點，來不及降為零，
 解不成立。

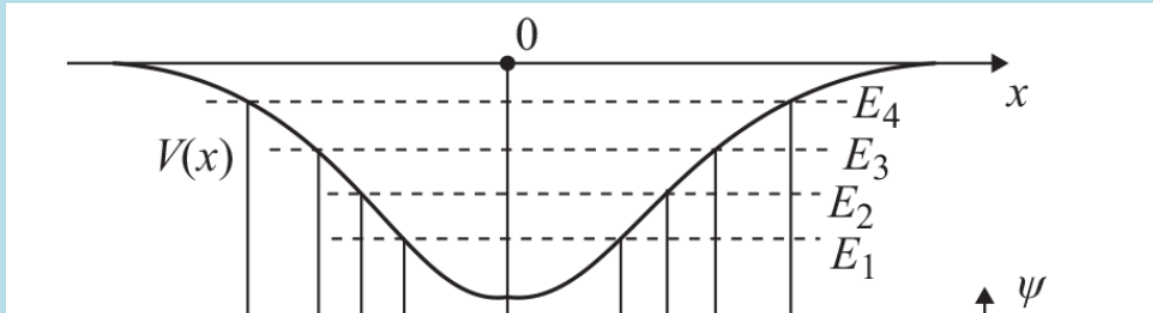


對於 E_2 ，折返點右移！
 傾斜度有較大間隔下降！
 傾斜度在原點恰好降為零！
 $E = E_2$ ，定態方程式有解！

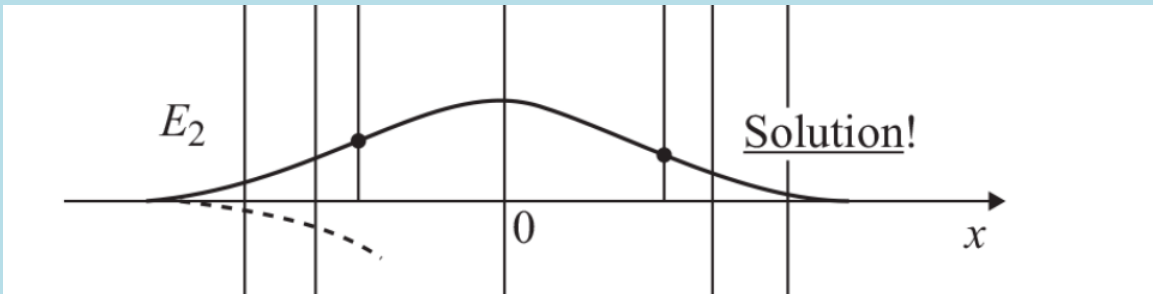


對於大於 E_2 的 E_3 ，斜率在原點前變號！但函數不為零，解又不成立了。
 在以上的範圍，能量只能是 E_2 ，大一點小一點都不行，能量是量子化的。

位能左右對稱，



定態方程式的解是對稱的：偶函數。

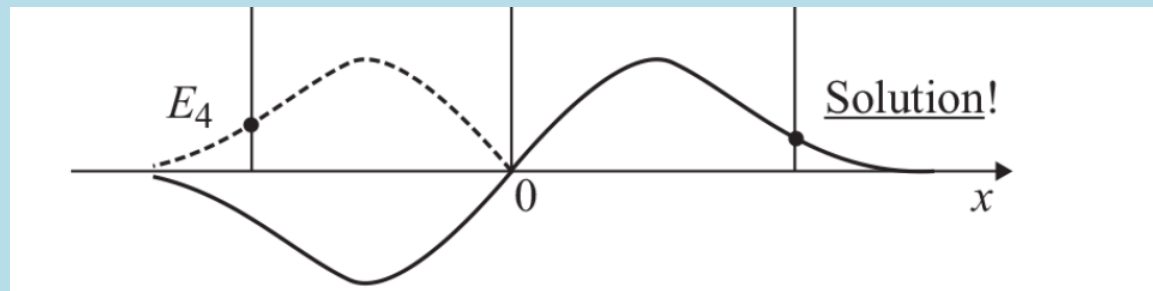


偶函數在原點的斜率必須為零！

物理應該對稱，但物理是由狀態函數的平方決定，

狀態波函數也可以是反對稱，意思是右邊函數式左邊函數乘 -1 。

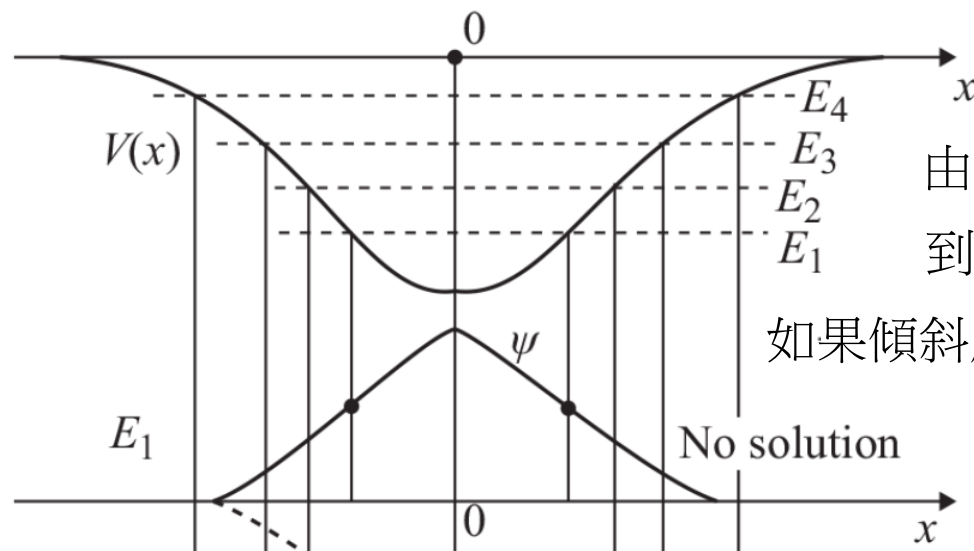
定態方程式的解也可以反對稱的：稱為奇函數，例如：



但注意！如此奇函數在原點的函數值必須為零！

見課本3-6

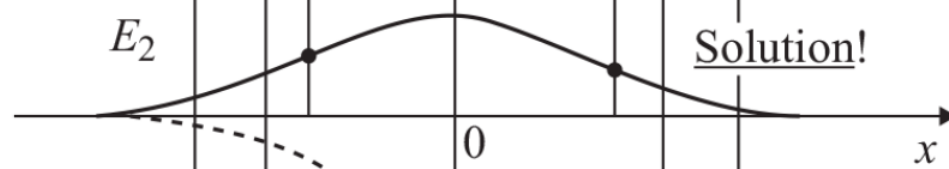
有較細緻的討論。



由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！

到折返點後，傾斜度又漸漸減小。

如果傾斜度到原點，來不及降為零，解不成立。

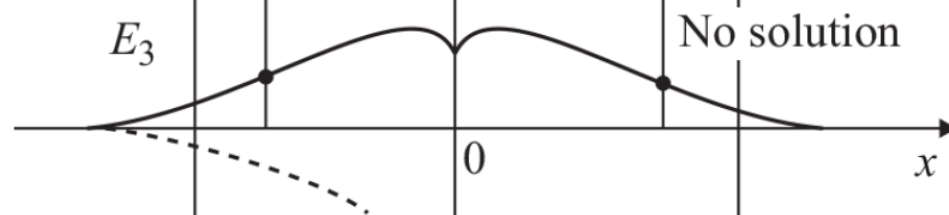


對於 E_2 ，折返點右移！

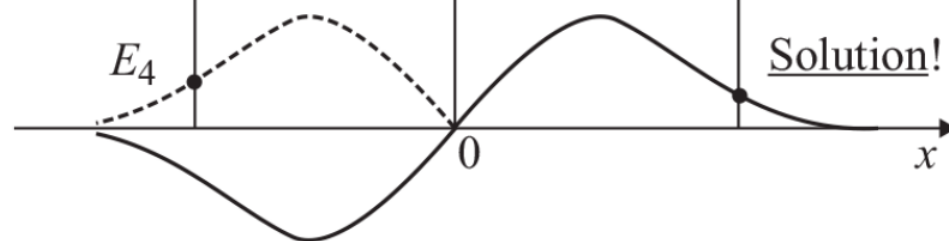
傾斜度有較大間隔下降！

傾斜度在原點恰好降為零！

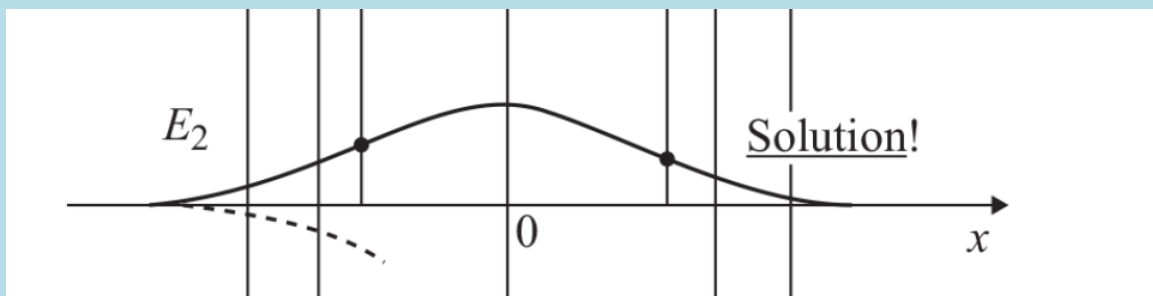
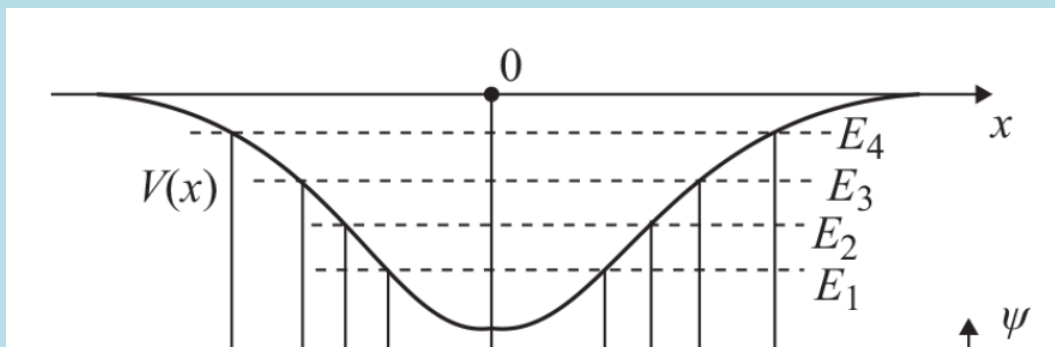
$E = E_2$ ，定態方程式有解！



對於大於 E_2 的 E_3 ，斜率在原點前變號，但函數不為零！解不成立。



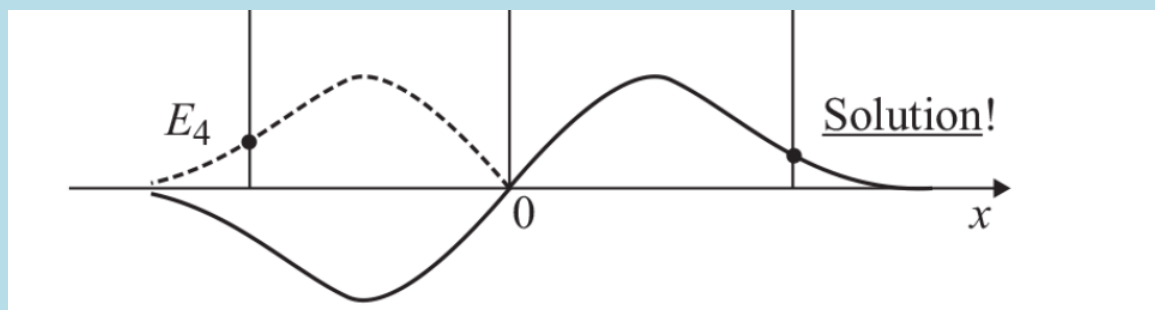
但直到某更大的 E_4 ，原點函數值降為零，此解成立。是一奇函數解！



這是偶函數。

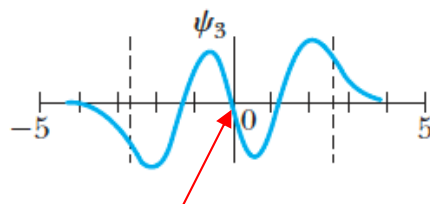
所以條件必須剛好成立，定態方程式才有解！

能量必須恰好使得傾斜度在 ∞ 由零加大，在折返點開始減小，到原點恰好減到零！

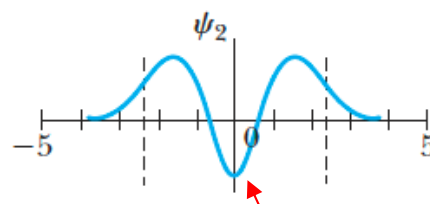


這是奇函數。

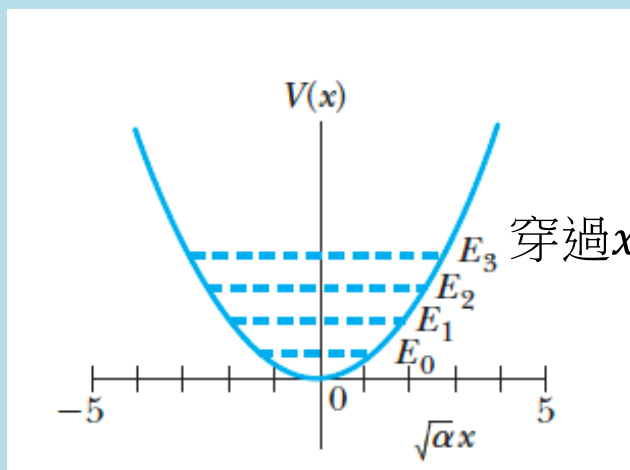
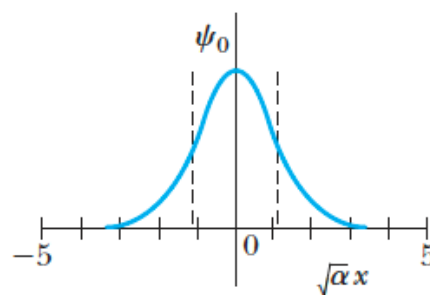
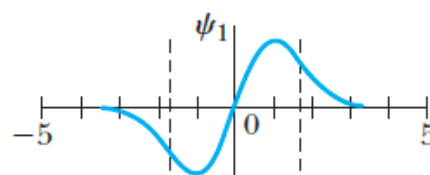
能量必須使得傾斜度在 ∞ 由零加大，在折返點開始減小直到變號，
函數值開始減小，同時使函數值在原點恰降到零！



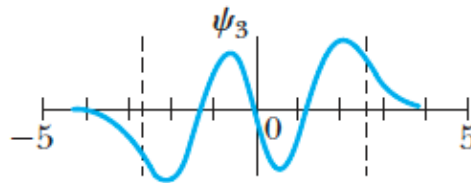
穿過 x 軸一次，奇函數在原點的函數值必須為零！



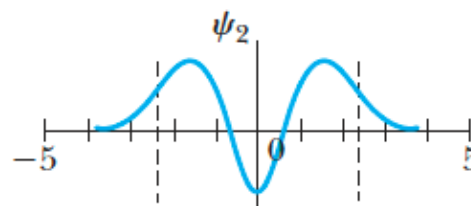
穿過 x 軸一次，偶函數在原點的斜率必須為零！



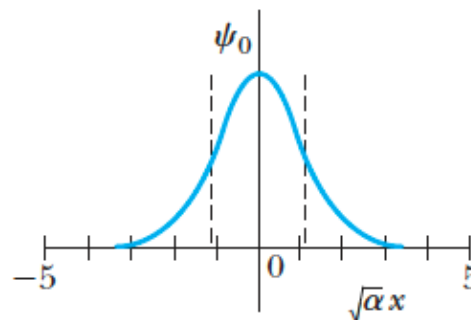
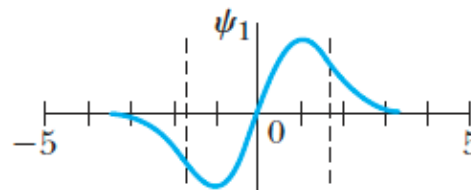
能量再增加，折返點距原點越遠，函數曲線可以來回穿過 x 軸數次，但必須滿足以上條件才是解。



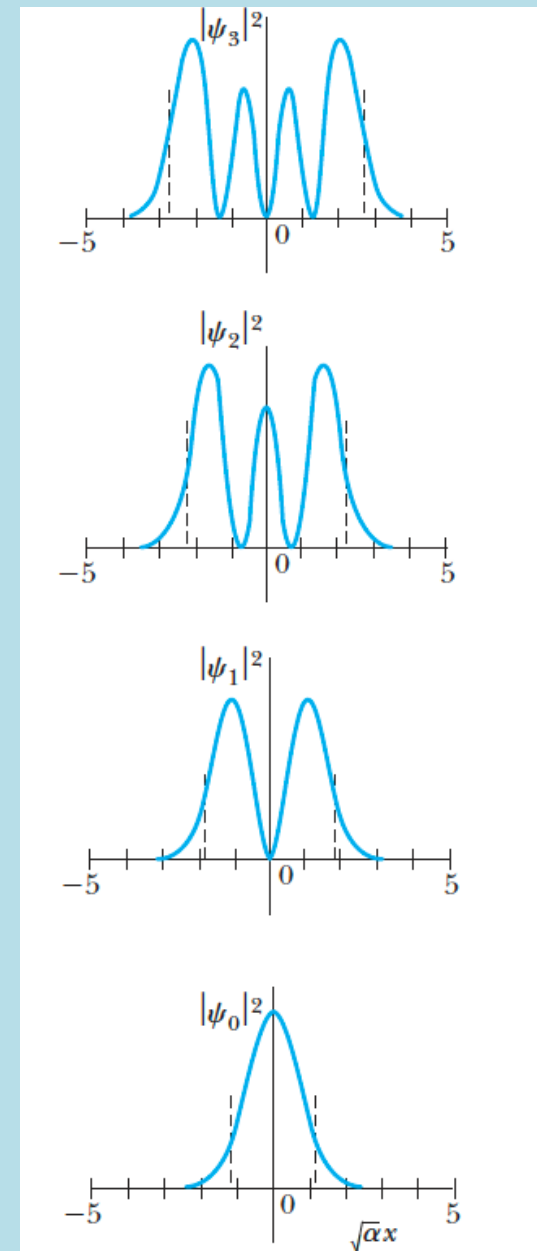
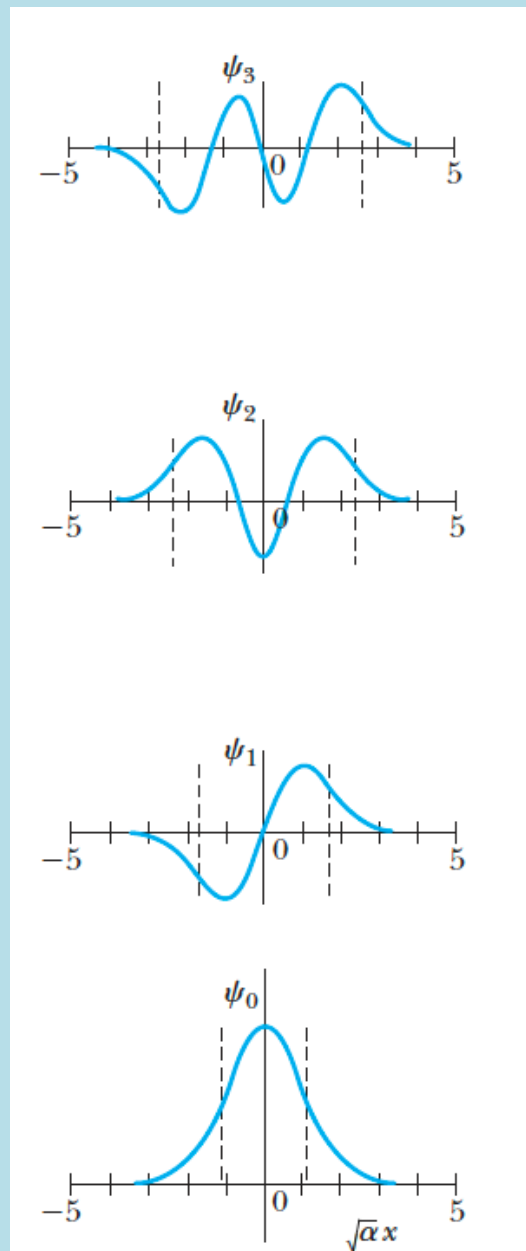
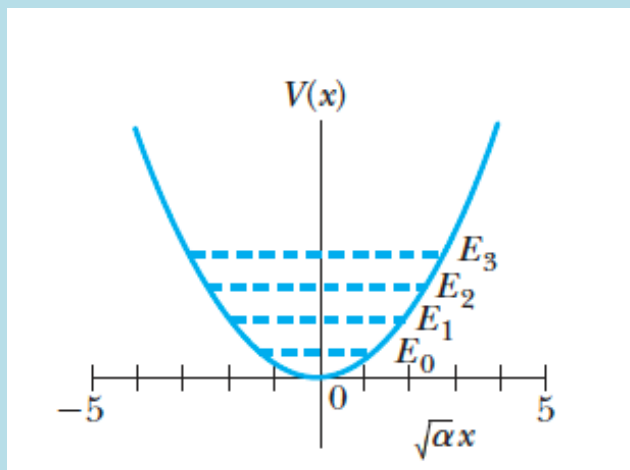
穿過 x 軸一次後使奇函數在原點的函數值為零！此能量給出一個解，共穿過 x 軸三次。



穿過 x 軸一次後使偶函數在原點的斜率為零！此能量給出一個解，共穿過 x 軸二次。

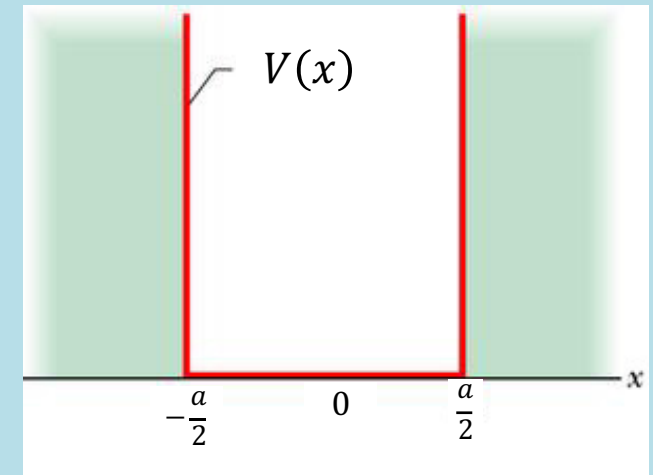
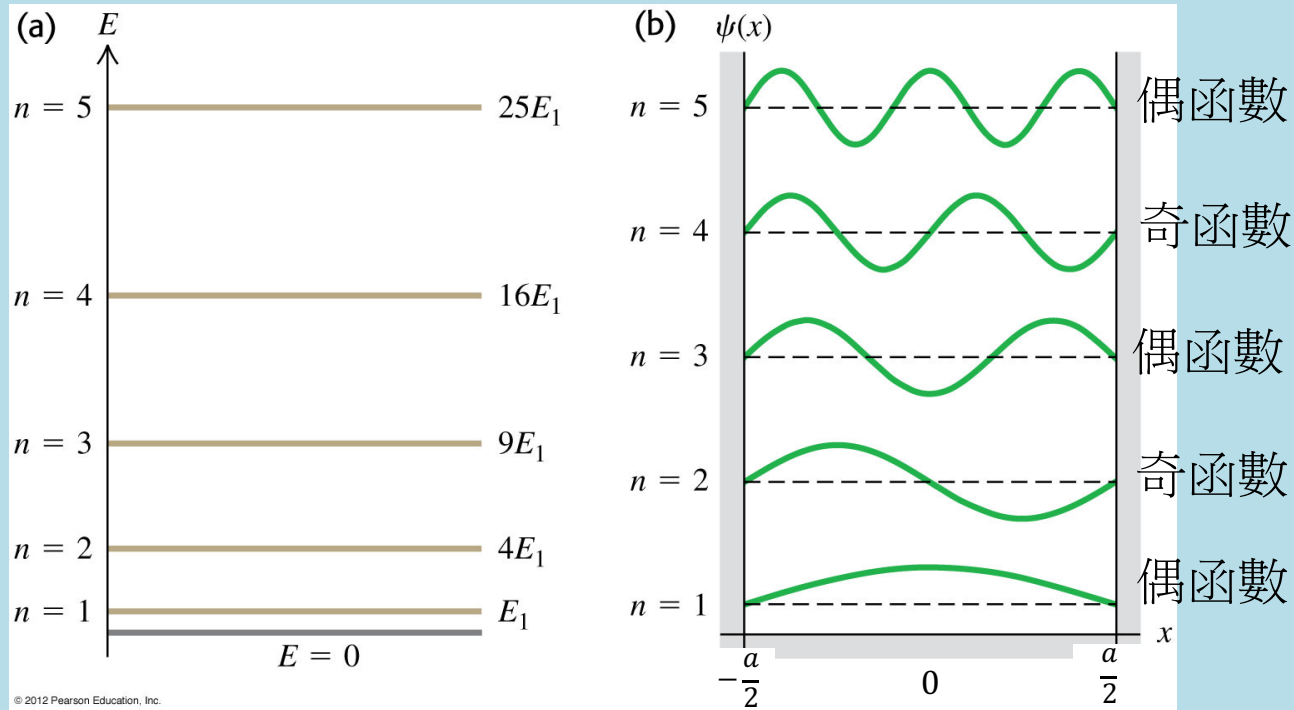


第 n 個能階定態解會有個 $n - 1$ 個Node節點。



偶函數、奇函數隨能量增加間隔出現！

在無限大位能的問題中，如果將原點置於位能井的中央，
就更能利用本徵函數是奇函數或偶函數的特性。



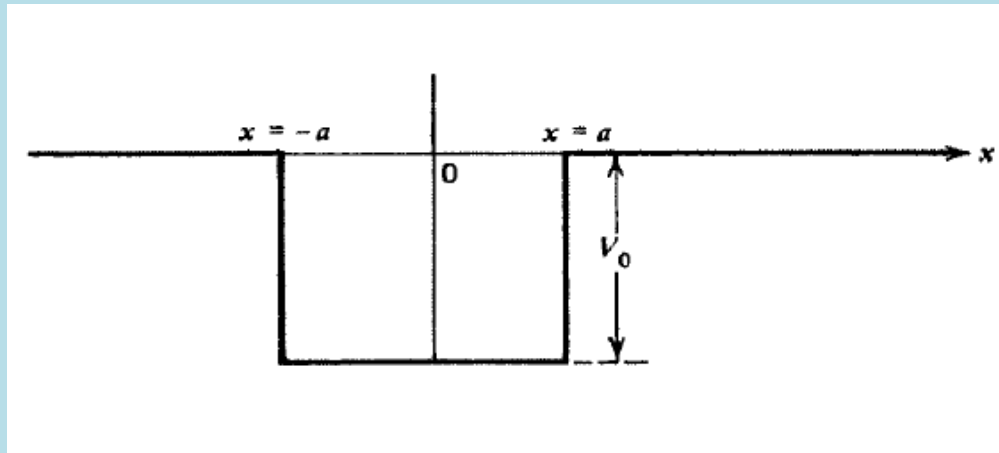
$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x$$

偶函數、奇函數也是間隔分佈！

偶函數在原點的斜率為零，奇函數在原點的函數值必須為零

第 n 個能階定態解會有個 $n - 1$ 個 Node 節點。

有限位能井 Finite Potential Well



$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= -V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned}$$

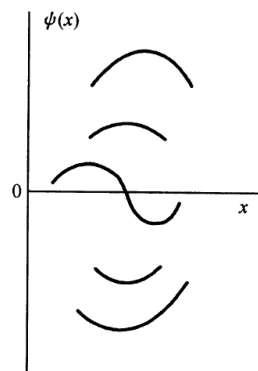
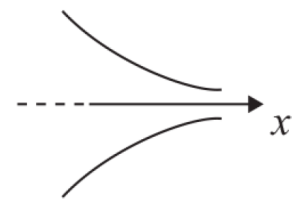
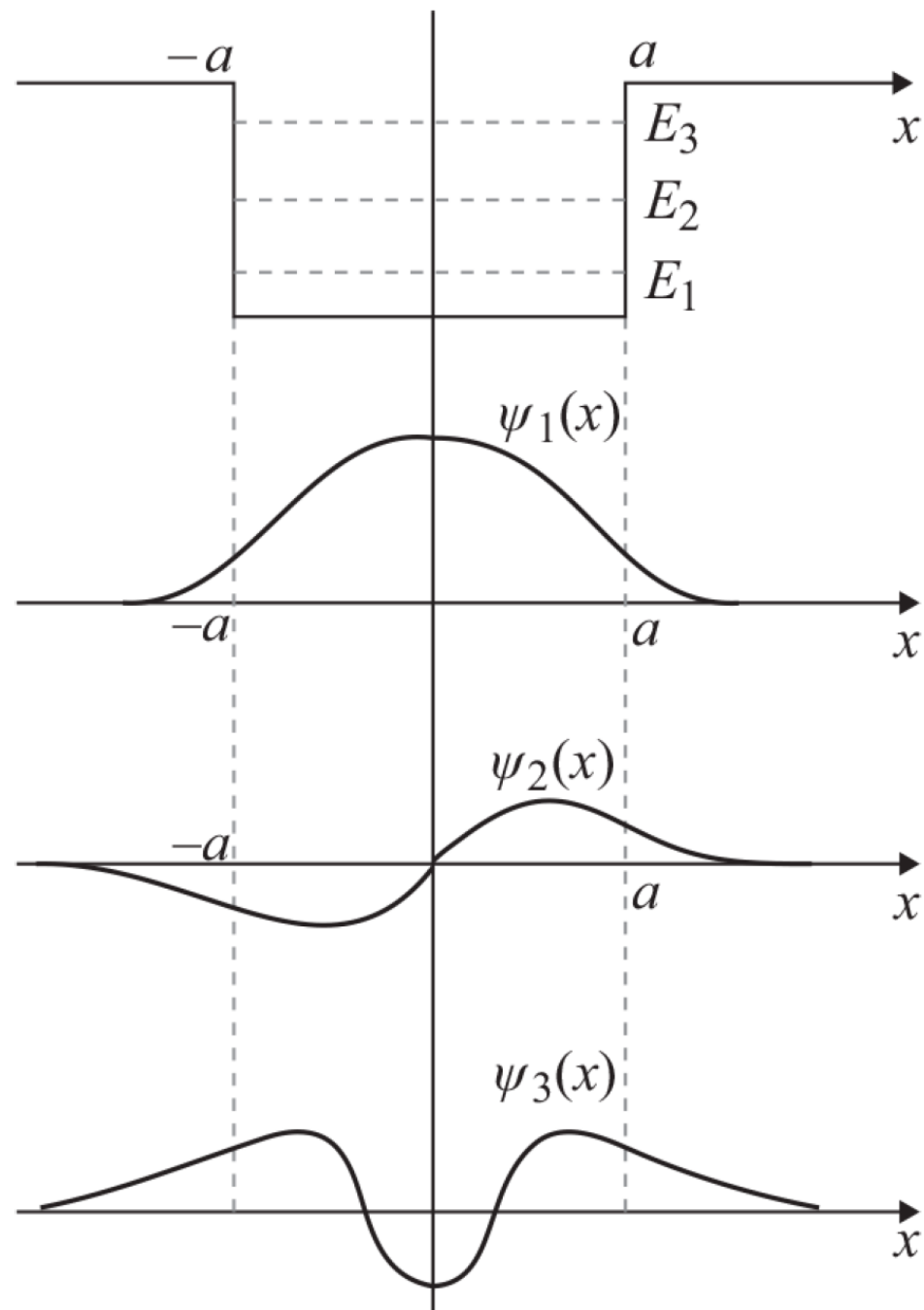
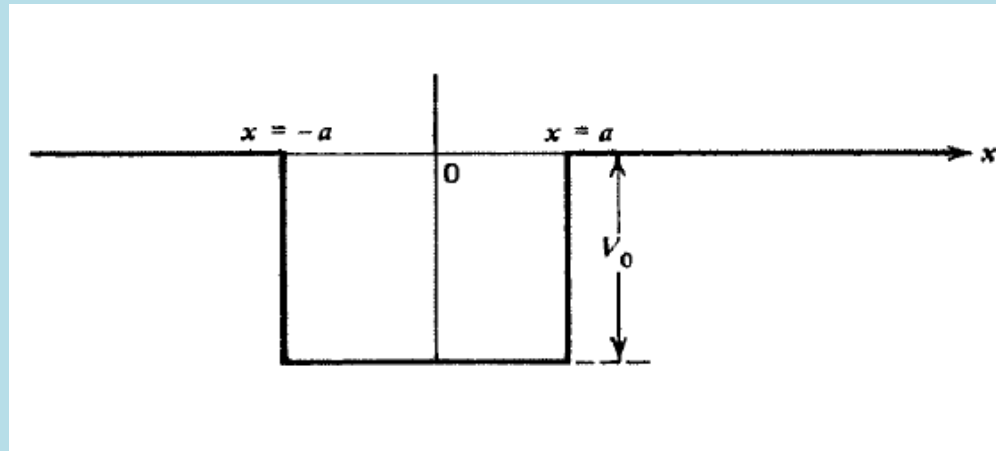


Figure 6.7

Sketching eigenstates of a finite square well potential. The energies are $E_1 < E_2 < E_3$, and the corresponding eigenstates are ψ_1 , ψ_2 , and ψ_3 , with ψ_1 the ground state.

有限位能井 Finite Potential Well

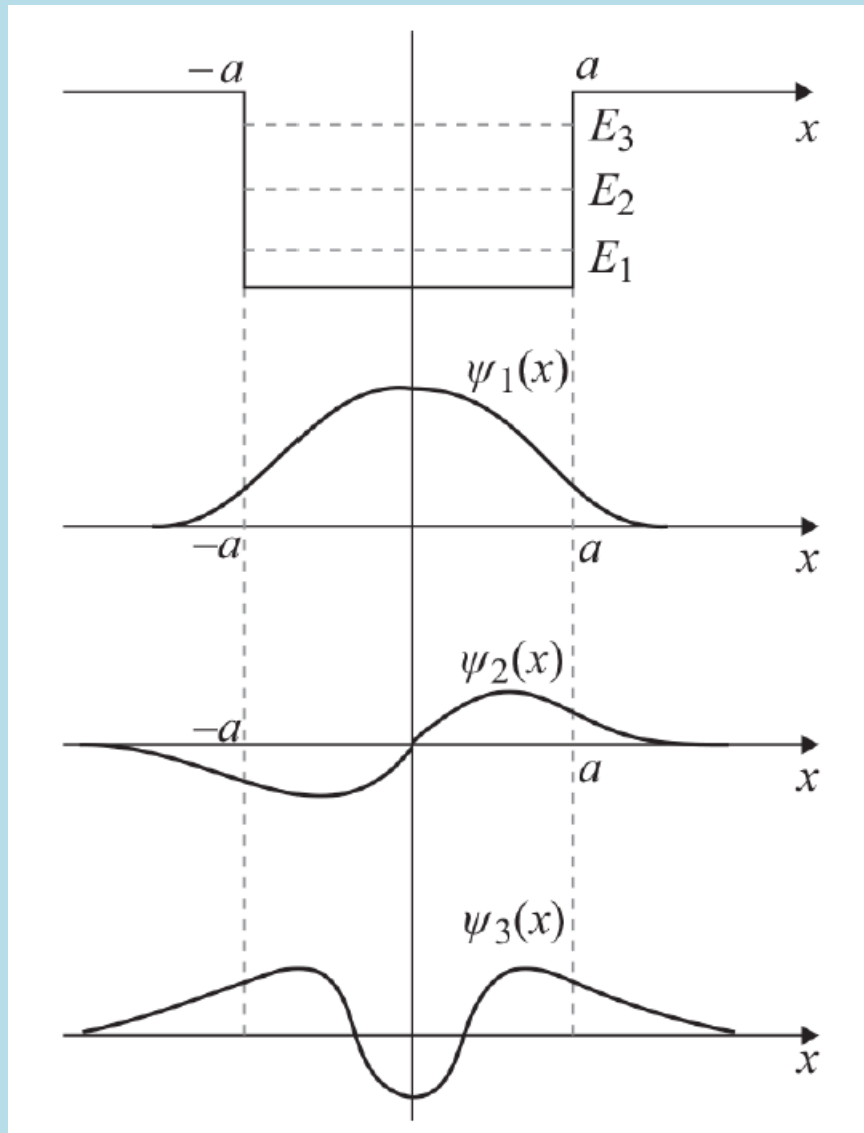


$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= -V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned}$$

functions. To solve the Schrödinger equation, we have to examine how the equation looks in the various regions where the potential is constant and then use boundary conditions to match the solutions across the points where the potential is discontinuous. We have the equation

一維位能的問題有時可以分解為一段段常數位能的區域，可以分開求解。
然後在邊界處，以連續條件將得到的各個解聯(match)起來。

首先考慮 $E < 0$ ，能量可能為離散的定態



在位能井內，電子如同自由粒子！

$$-a < x < a$$

$$0 > E > V = -V_0$$

在此區域古典的粒子可以存在。

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

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

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

解也如同自由粒子波！

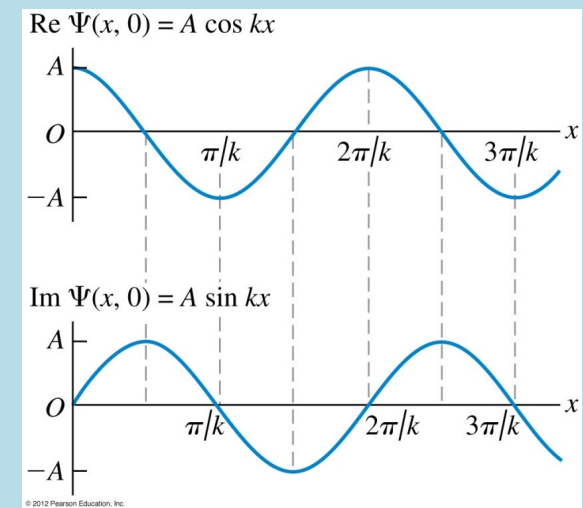
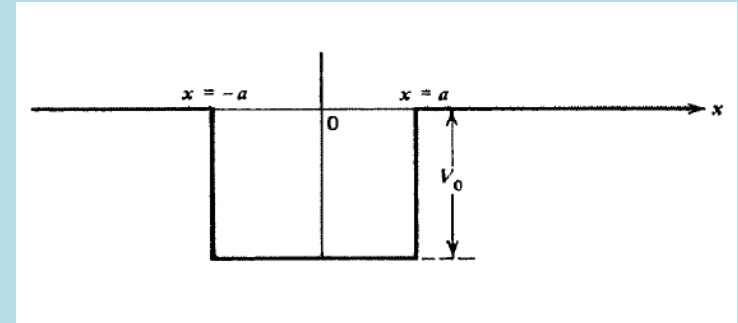
$$\psi_E = C_1 e^{iqx} + C_2 e^{-iqx}$$

$$= A \cos qx + B \sin qx$$

這兩個解分別是偶函數與奇函數。

可以分開考慮！

從偶函數開始： $\psi_E = A \cos qx$



在位能井外：

$$x < -a, \text{ 及 } x > a \quad E < V = 0$$

古典的粒子不能存在這樣的區域，
方程式差一個負號！

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \alpha^2\psi_E \quad E < 0 \Rightarrow \psi_E \equiv \alpha^2\psi_E$$

$$\psi_E(x) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{-\alpha x}$$

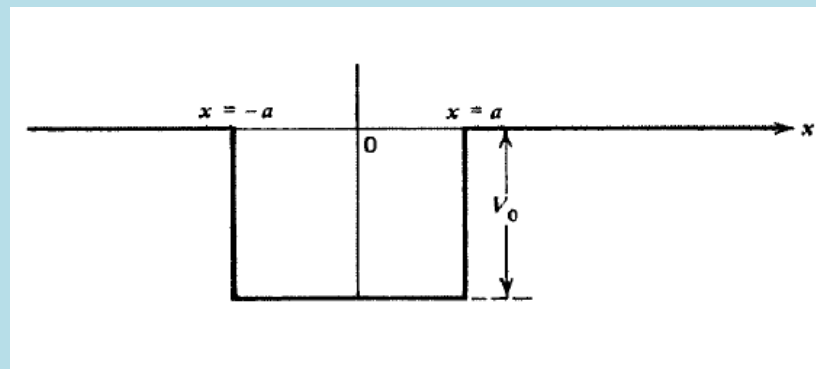
為使無限遠處，波函數不發散：

$$x > a$$

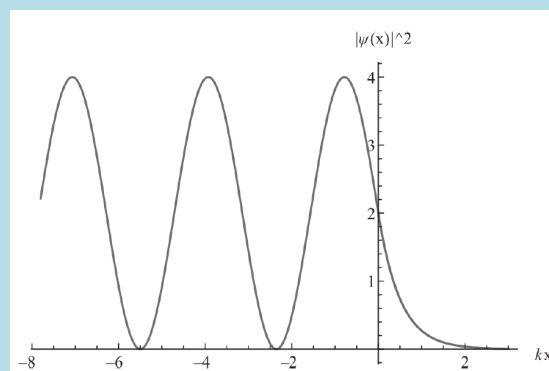
$$\psi_E(x) = C_2 e^{-\alpha x}$$

$$x < -a$$

$$\psi_E(x) = C_1 e^{\alpha x}$$



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



古典粒子不能存在，就表現在波函數指數遞減之上！

在量子力學中，此區域波函數還是有解，只是不再是正弦波，而是指數函數。

在位能井邊界上：

$$x = -a, \text{ 及 } x = a$$

$\psi(x)$ 必須連續！

否則微分會是無限大，微分決定流量，不能是無限大。

先從偶函數開始討論：Even Function。

$$x = a$$

$$\psi_E(x) = A \cos qx$$

$$\psi_E(x) = C_2 e^{-\alpha x}$$

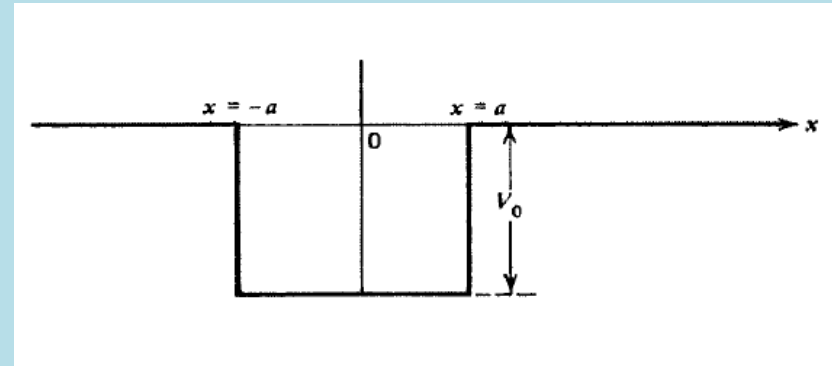
$$A \cos qa = C_2 e^{-\alpha a}$$

$$x = -a$$

$$\psi_E(x) = A \cos qx$$

$$\psi_E(x) = C_1 e^{\alpha x}$$

$$A \cos qa = C_1 e^{-\alpha a}$$



兩邊對稱，解是一樣的！只要考慮一邊即可。

$x = a$ $\psi(x)$ 與其微分都必須連續！

$$\psi'_E(x) = -Aq \sin qa$$

$$\psi'_E(x) = -\alpha C_2 e^{-\alpha x}$$

$$Aq \sin qa = \alpha C_2 e^{-\alpha a}$$

$\psi(x)$ 連續的條件：

$$A \cos qa = C_2 e^{-\alpha a}$$

兩式相除，即消去常數：

$$q \tan qa = \alpha$$

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

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

注意角波數 q 與 α 都是隨能量 E 變化的變數，而 E 是我們要由上式求解的對象。

角波數 q ，可轉為無單位的數值變數 y ：定義

$$qa \equiv y$$

$$y \tan y = \alpha a$$

另一個變數 α 可以用 y 表示出來，因為：

$$\alpha^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

λ 是常數！



$$y \tan y = \sqrt{\lambda - y^2}$$

$$\alpha a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - y^2} \equiv \sqrt{\lambda - y^2}$$

$$y \tan y = \sqrt{\lambda - y^2}$$



$$\tan y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$$

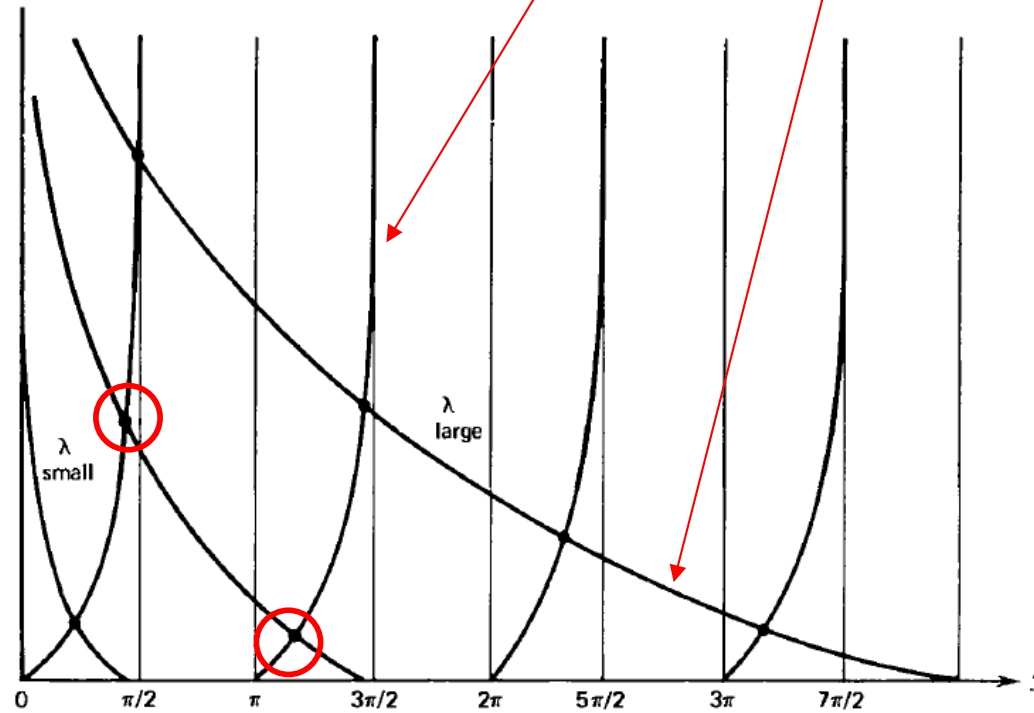


Figure 4-7 Location of discrete eigenvalues for even solutions in a square well. The rising curves represent $\tan y$; the falling curves are $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ for different values of λ .

$$qa \equiv y$$

由 y 的解即得到 q ，也就得到 E 。

$x = a$ Odd Function

$$\psi_E(x) = A \sin qx$$

$$\psi'_E(x) = Aq \cos qx$$

$$\psi_E(x) = C_2 e^{-\alpha x}$$

$$\psi'_E(x) = -\alpha C_2 e^{-\alpha x}$$

$$A \sin qa = C_2 e^{-\alpha a}$$

$$Aq \cos qa = -\alpha C_2 e^{-\alpha a}$$

兩式相除，即消去常數：

$$q \cot qa = -\alpha$$

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

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

角波數 q ，可轉為無單位的數值變數 y ：定義

$$qa \equiv y$$

$$y \cot y = -\alpha a$$

另一個參數 α 可以用 y 表示出來，因為：

$$\alpha^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

λ 是常數！



$$y \cot y = \sqrt{\lambda - y^2}$$

$$\alpha a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - y^2} \equiv \sqrt{\lambda - y^2}$$

$$y \cot y = -\sqrt{\lambda - y^2}$$



$$-\cot y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$$

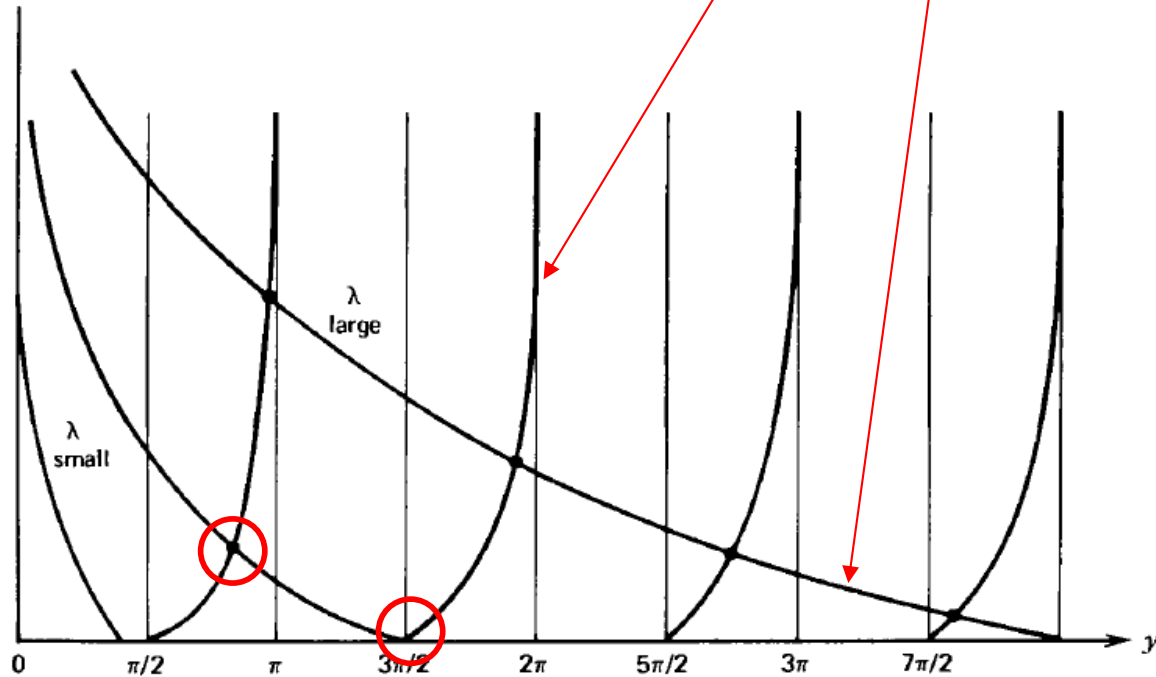
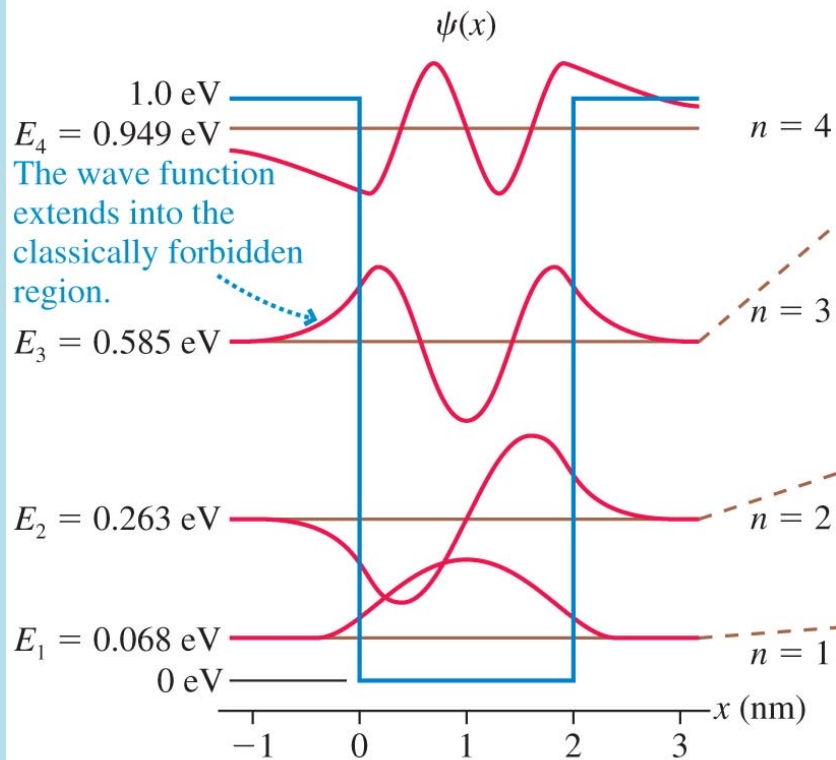


Figure 4-8 Location of discrete eigenvalues for odd solutions in a square well. The rising curves represent $-\cot y$; the falling curves are $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ for different values of λ . Note that there is no eigenvalue for $\lambda < (\pi/2)^2$.

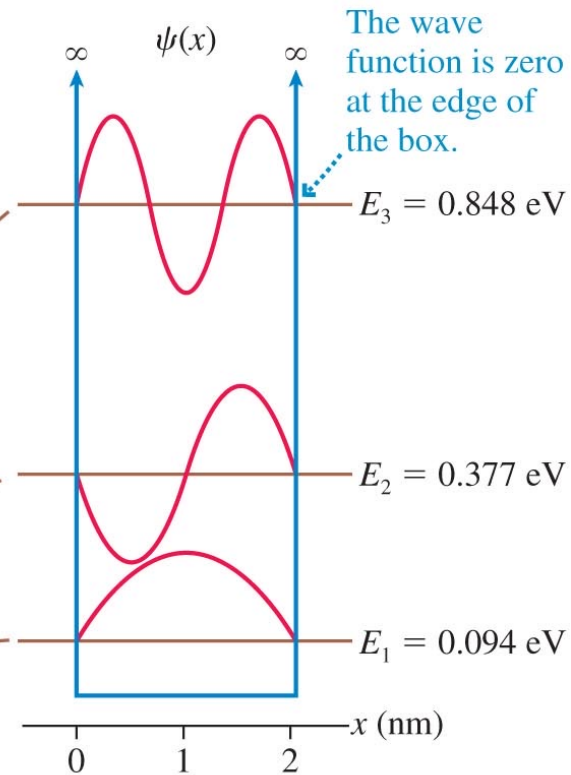
$$qa \equiv y$$

由 y 的解即得到 q ，也就得到 E 。

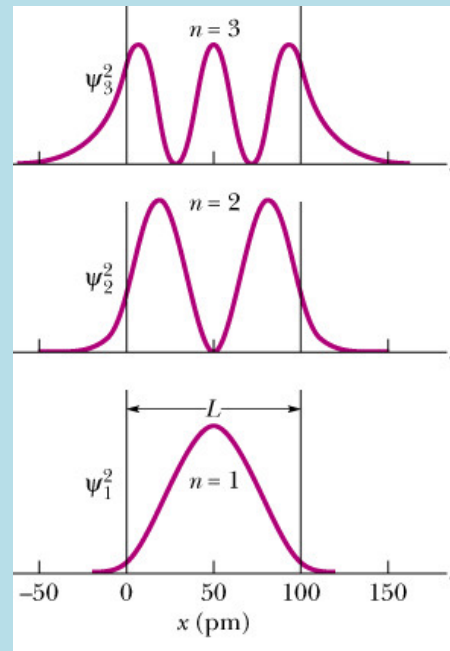
(a) Finite potential well



(b) Particle in a rigid box



Copyright © 2008 Pearson Education, Inc., publishing as Pearson Addison-Wesley.

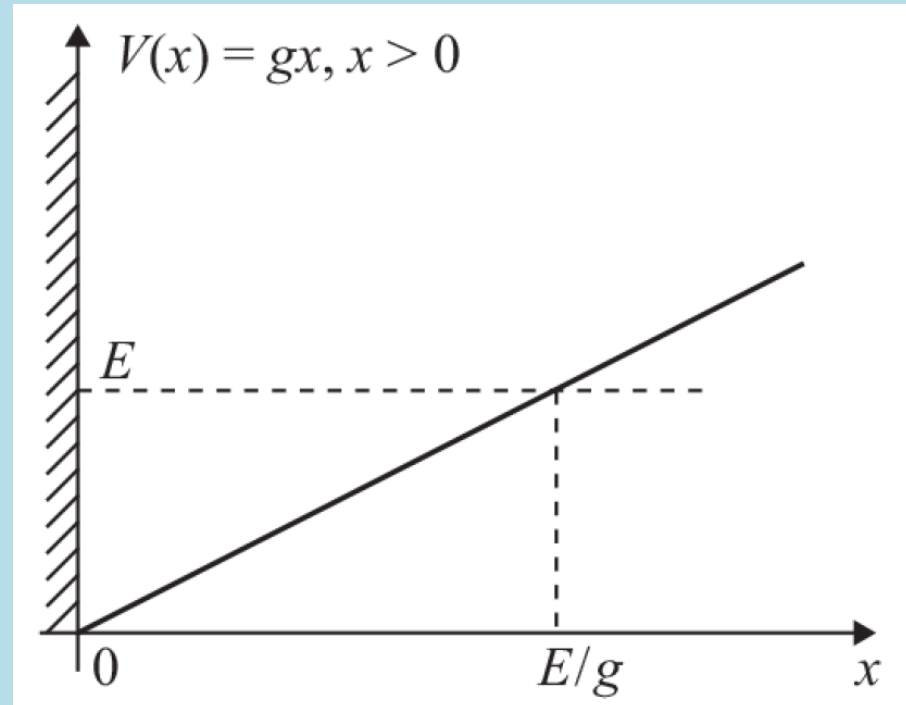
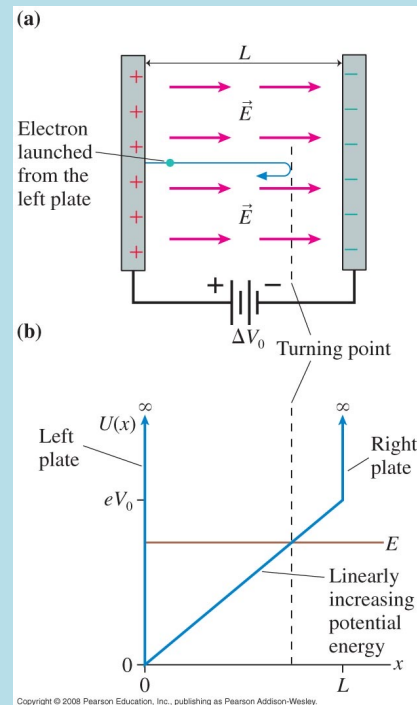


電容器中的電子

Linear Potential

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{eV_0}{L} x \cdot \psi_E(x) = E \cdot \psi_E(x)$$

The solution we have for step potential: $\psi_E = Ae^{ikx} + Re^{-ikx}$ *totally cannot apply here*. Some of you still copy here the formula $k \equiv \sqrt{\frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}}$. But it does not make sense.



定態方程式的解必須滿足在原點為零。

一邊是折返點，

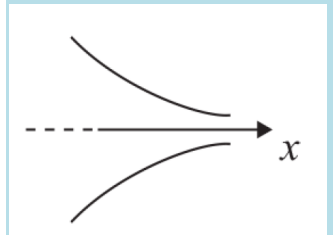
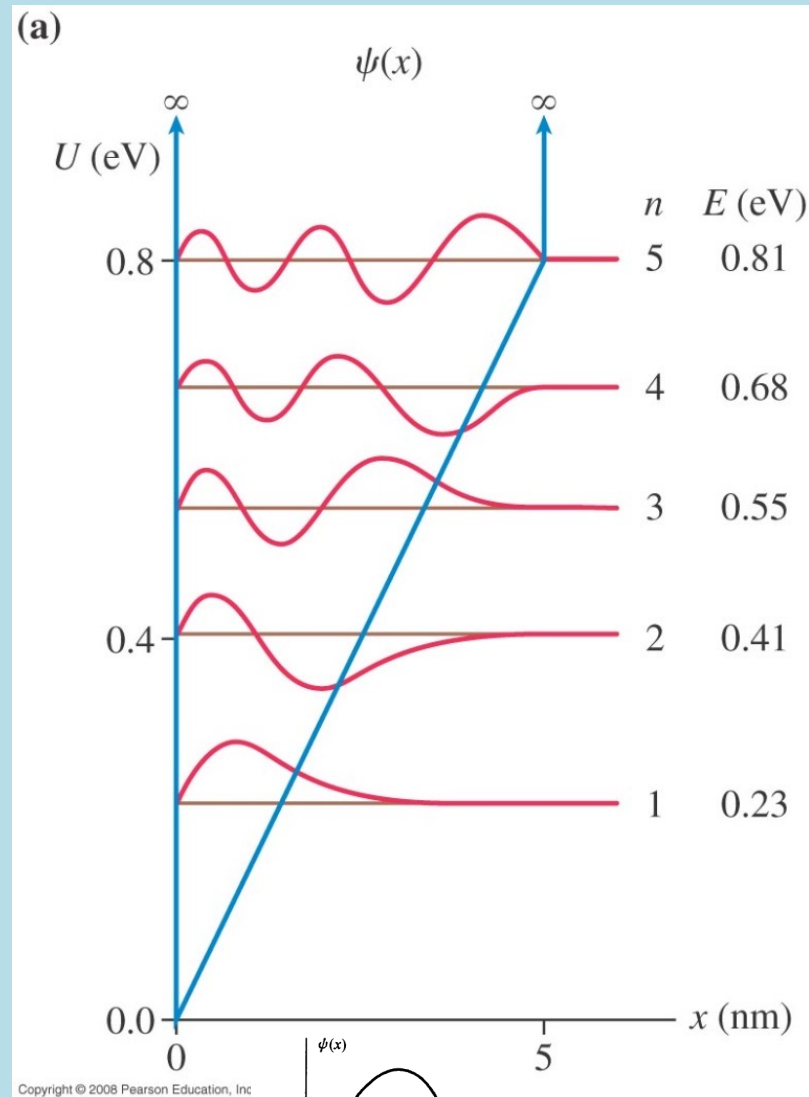
波函數指數遞減。

在容許區會來回振盪。

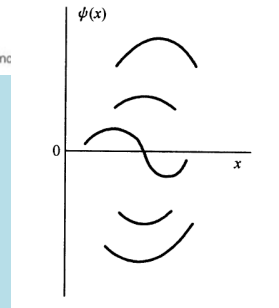
另一邊原點是無限大位能。

波函數必須降到零。

束縛態，能量量子化！



E_n 能階定態解會有個 $n - 1$ 個 Node 節點。



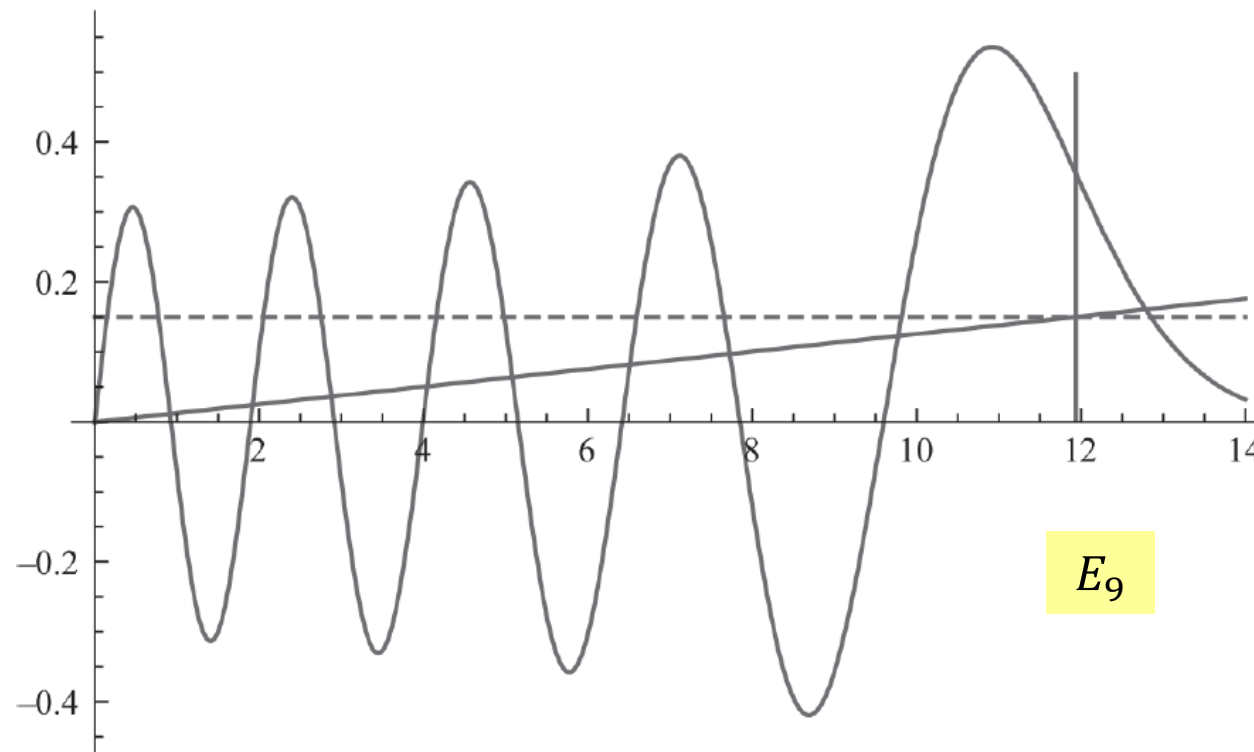


Figure 7.12

A wave function with eight nodes on a linear potential plus a wall at the origin. Both the de Broglie wavelength and the amplitude of the oscillation grow as we move to the right.

E_n 能階定態解會有個 $n - 1$ 個 Node 節點。

這是一個可以證明的定理。

We can do better! Solving the Equation!

1926.

№ 6.

ANNALEN DER PHYSIK.

VIERTE FOLGE. BAND 79.

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger.*

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

1. Der Plancksche Oszillator. Die Entartungsfrage.

Wir behandeln zunächst den eindimensionalen Oszillator. Die Koordinate q sei die Elongation multipliziert mit der Quadratwurzel aus der Masse. Die beiden Formen der kinetischen Energie sind dann

$$(20) \quad \bar{T} = \frac{1}{2} \dot{q}^2, \quad T = \frac{1}{2} p^2.$$

Die potentielle Energie sei

$$(21) \quad V(q) = 2\pi^2 \nu_0^2 q^2,$$

wo ν_0 die Eigenfrequenz im Sinne der Mechanik. Dann lautet Gleichung (18) für diesen Fall:

$$(22) \quad \frac{d^2 \psi}{dq^2} + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - 2\pi^2 \nu_0^2 q^2) \psi = 0.$$



Scanned at the American Institute of Physics

$$\psi_E(x) \equiv u(x)$$

$$\frac{d^2 \psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} kx^2 - E \right) \psi_E$$



$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 u - \frac{2mE}{\hbar^2} u$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 u - \frac{2mE}{\hbar^2} u \quad \text{這些常數很繁雜！}$$

很神奇又自然的：我們可以取任一個較方便的長度單位來解此方程式。

得到解後再換算回原單位！

$$\frac{m\omega}{\hbar}$$

單位是長度平方的倒數。

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1$$

單位是長度。

我們可以選擇長度單位使此式的數值等於1。

$$\frac{m\omega}{\hbar} = 1$$

那第一個常數 $\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2}$ 也等於1。

$$m = \frac{\hbar}{\omega}$$

方程式簡化為：

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = x^2 u - \frac{2E}{\hbar\omega} u$$

方程式只剩一個參數 E ， $\frac{2E}{\hbar\omega}$ 無單位，可以定義 $\hbar\omega$ 為單位能量，引入：

$$\varepsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = x^2 u - \varepsilon u$$



$$\frac{d^2 u}{dy^2} = y^2 u - \varepsilon u$$

給此單位制中的位置、新的名字 y 。

他們可以很容易換算回到原來的單位制的位置 x 。

$$x = y \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

薛丁格怎麼解這個方程式？

$$\frac{d^2 u}{dy^2} = (y^2 - \varepsilon)u$$

Sei zur Abkürzung

$$(23) \quad a = \frac{8\pi^2 E}{h^2}, \quad b = \frac{16\pi^4 \nu_0^2}{h^2}$$

also

$$(22') \quad \frac{d^2 \psi}{dq^2} + (a - bq^2) \psi = 0.$$

Wir führen als unabhängige Variable ein

$$(24) \quad x = q \sqrt[4]{b}$$

und erhalten

$$(22'') \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left(\frac{a}{\sqrt[4]{b}} - x^2 \right) \psi = 0.$$

Die Eigenwerte und Eigenfunktionen dieser Gleichung sind bekannt.¹⁾ Die Eigenwerte sind in den hier benützten Zeichen

$$(25) \quad \frac{a}{\sqrt[4]{b}} = 1, 3, 5 \dots (2n+1) \dots$$

Die Eigenfunktionen sind die *Hermite'schen Orthogonalfunktionen*

$$(26) \quad e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x).$$

他直接知道答案！

$$u_0(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$$

這是一個指數遞減的高斯分佈函數，乘上一個Hermite多項式！

$$\frac{d^2u}{dy^2} - y^2u + \varepsilon u = 0$$

有限次多項式無法是此式的解，因為 y^2u 顯然比 $\frac{d^2u}{dy^2}$ 及 εu 來得高階。
 y^2u 的最高次項沒有人可以抵消。

而且有限次多項式在無限遠處會發散，不符合定態的要求。

退而求其次，薛丁格猜想解可能是一個非多項式函數 u_0 乘上多項式 $h(y)$ 。

$$u(y) \equiv u_0(y) \times h(y)$$

但薛丁格如何猜到正確的 $u_0 = e^{-\frac{y^2}{2}}$ 呢？

$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$$

猜想：在 $y \rightarrow \infty$ ， u_0 必須趨近於零，且比多項式 h 重要，才能使整個解趨零。
 多項式相比之下如一個常數，在 $y \rightarrow \infty$ ， $u \sim u_0$ 。

而在無限遠處 $y \rightarrow \infty$ ，第二項比較重要。

$$y^2u - \varepsilon u \rightarrow y^2u$$

$$\frac{d^2u}{dy^2} - y^2u + \varepsilon u = 0$$



$$\frac{d^2u_0}{dy^2} - y^2u_0 = 0$$

解出此方程式就可以得到 u_0 。

而 u_0 很容易就可以找到，就是一個高斯分佈函數，課本有細膩的推導 P86。

我們直接代入驗證：

$$u_0(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\frac{d^2 u_0}{dy^2} - y^2 u_0 = y u_0 \sim 0$$

因此如果這樣設定：

$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times h(y)$$

$h(y)$ 就可能有有限次多項式的解！

$h(y)$ 滿足的方程式為：

$$\frac{d^2 u}{dy^2} = y^2 u - \varepsilon u \quad \rightarrow \quad e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{d^2 h}{dy^2} - 2y e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{dh}{dy} + y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} h - e^{-\frac{y^2}{2}} h = (y^2 - \varepsilon) e^{-\frac{y^2}{2}} h$$

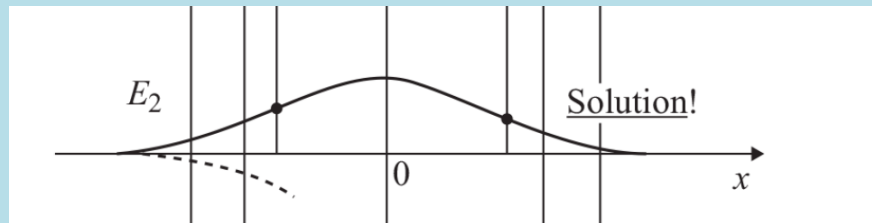
$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0 \quad y^2 h(y) \text{真的消失了。}$$

後兩項是同次多項式，第一項則較低次，故後兩項的最高次項可以彼此抵消。

讓我們先感覺一下這個函數 $u(y)$ 的特性：

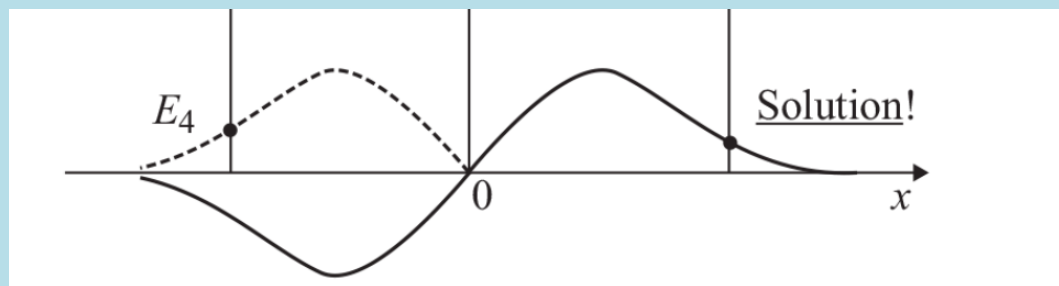
$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$$

若式中(特別的多項式)是常數，此函數就是一個單純的高斯分佈：
在 ∞ 趨近指數遞減，在原點附近維持緩慢變化：



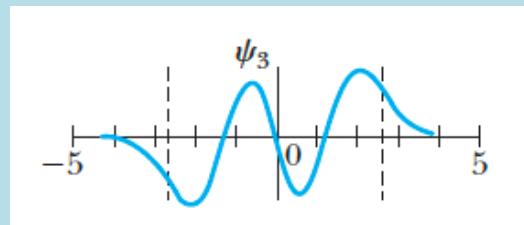
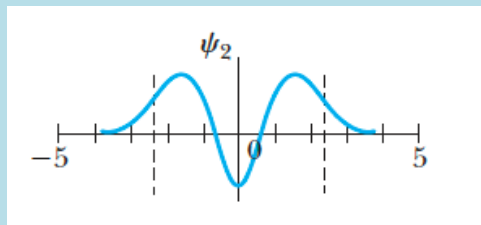
這是偶函數。

若(特別的多項式)是一次方 x ，此函數在遠處是高斯分佈：
在 ∞ 趨近指數遞減，在原點附近穿過 x 軸，在此函數需為零：



這是奇函數。

大膽猜想：此解 $u(y)$ ，在趨近 ∞ 處由高斯分佈控制，在原點附近則由多項式控制！
該多項式若是 n 次，則會穿過 x 軸 n 次， n 越大能量越大。



以上是一個猜測的過程，是否可行，必須直接求解：

$$\frac{d^2h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0$$

這個方程式有有限次多項式解嗎？先讓我們假設 $h(y)$ 為 n 次多項式：

$$h(y) = a_n y^n + a_{n-1} y^{n-1} + a_{n-2} y^{n-2} + \dots$$

代入後先看各項的最高次的貢獻：

$$n(n-1)a_n y^{n-2} - 2na_n y^n + (\varepsilon - 1)a_n y^n$$

第一項的貢獻其實小兩次，在此可以先忽略。第二項與第三項必須抵消。

$$-2na_n y^n + (\varepsilon - 1)a_n y^n = 0$$

簡化後得到一個極漂亮的式子：

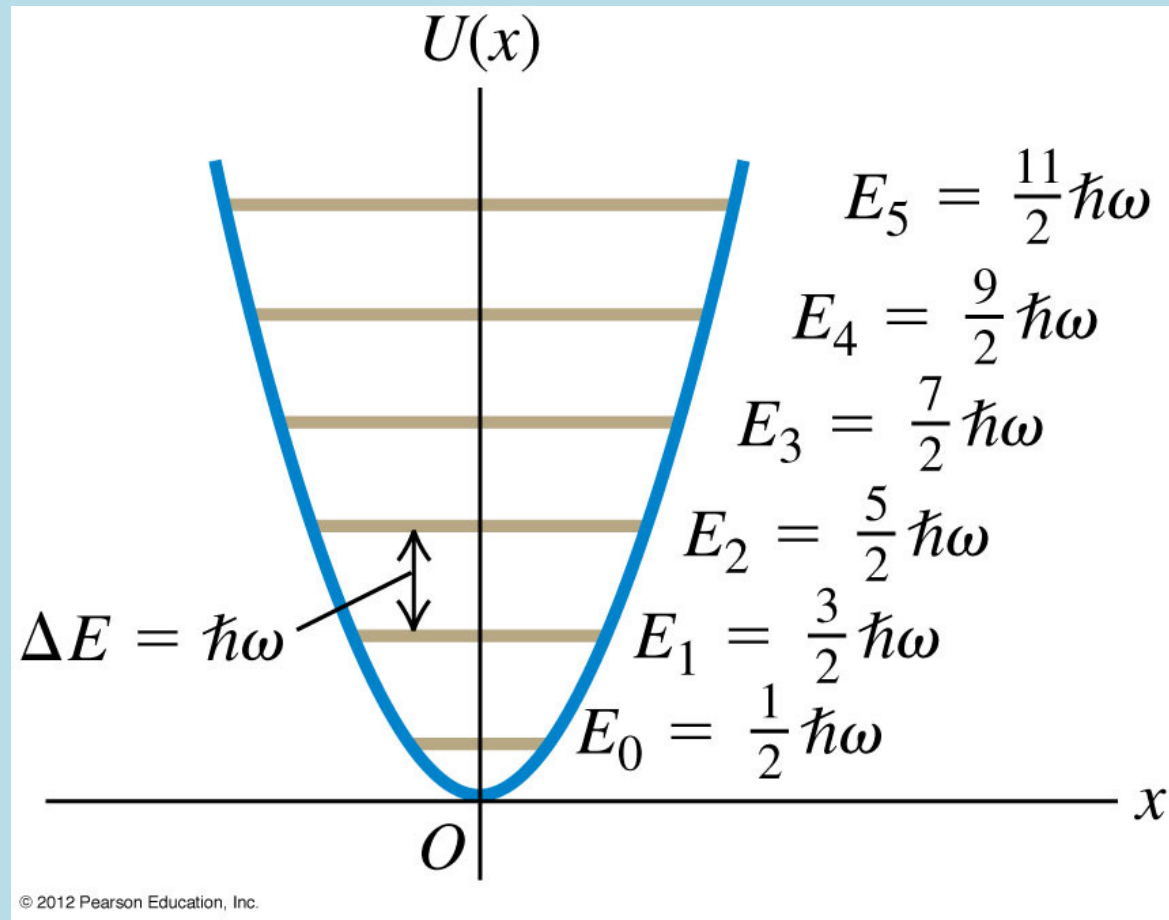
$$-2n + (\varepsilon - 1) = 0 \quad n \text{ 是多項式解的幕次，} \varepsilon \text{ 是該解對應的能量。}$$

$$\varepsilon = 2n + 1 \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$$

只有當 ε 為奇整數時，方程式才有可歸一化的有限次多項式解！

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{能量只有在這些值時，定態方程式才有解！}$$

量子簡諧運動的能量是量子化的！



$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

完整的解可以以Recursion遞迴關係得到：

$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0$$

已知 $\varepsilon = 2n + 1$ 對應的解為 n 次多項式，記為： $h_n(y)$ ，寫成：

$$h_n(y) = a_n y^n + a_{n-1} y^{n-1} + a_{n-2} y^{n-2} + \dots = \sum_{j=0 \text{ 或 } 1}^n a_j y^j$$

$$\sum_{j=0 \text{ 或 } 1}^n j(j-1)a_j y^{j-2} - 2 \sum_{j=0 \text{ 或 } 1}^n j a_j y^j + 2n \sum_{j=0 \text{ 或 } 1}^n a_j y^j = 0$$

收集 y^i 的項，係數必須為零：

$$(i+2)(i+1)a_{i+2} - 2ia_i + 2na_i = 0$$

$$a_{i+2} = \frac{2i - 2n}{(i+2)(i+1)} a_i$$

Recursion遞迴關係

$$a_{i+2} = \frac{2i - 2n}{(i+2)(i+1)} a_i$$

Recursion遞迴關係

注意多項式中偶數次項是偶函數，奇數次項是奇函數。

偶函數： n 是偶數

$$a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \cdots \rightarrow a_n$$

分子為零 $a_{n+2} = 0$ 遞迴停止。

其餘奇數次項係數都為零。

奇函數： n 是奇數

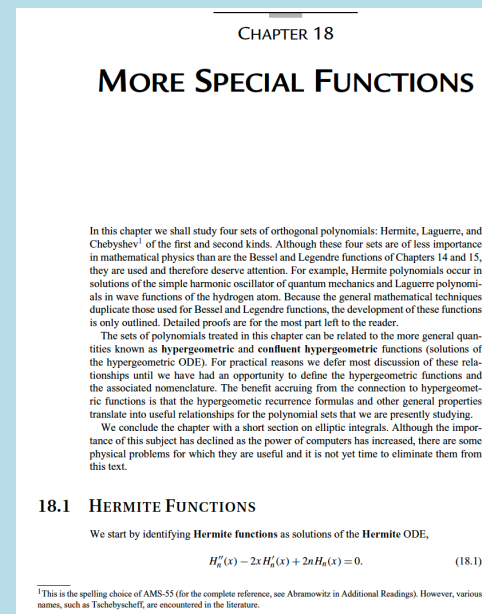
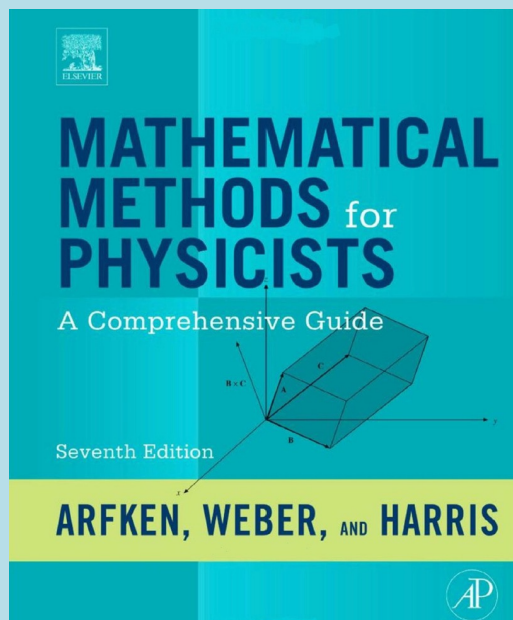
$$a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \cdots \rightarrow a_n$$

$a_{n+2} = 0$ 遞迴會停止。

其餘偶數次項係數都為零。

這樣多項式正是Hermite polynomials。

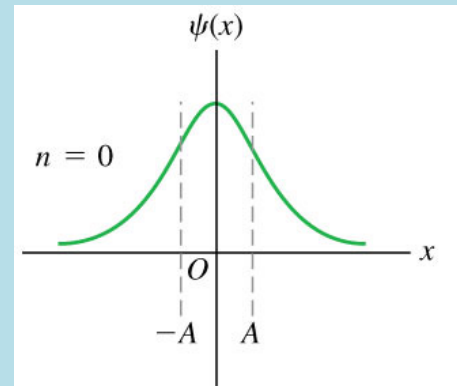
若 n 不是整數，遞迴不會停止，多項式是無限次，可證明所得的解會發散。



$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \cdot y \text{ 的 } n \text{ 次多項式 } h_n$$

$$a_{i+2} = \frac{2i - 2n}{(i+2)(i+1)} a_i$$

$$h_n(y) = \sum_{j=1}^n a_j y^j$$



前三個定態！

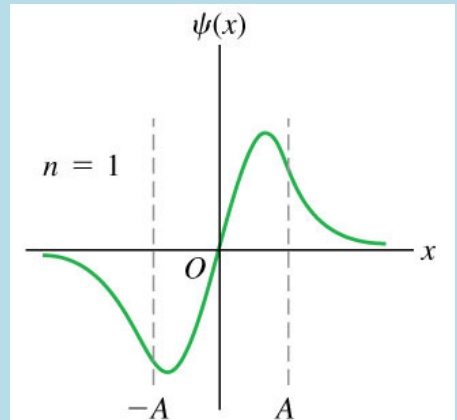
$$n = 0$$

$$h_0(y) = a_0, \quad u_0(y) = a_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$x = y \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Ground state

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$



常數則由歸一化條件給定：

$$n = 1$$

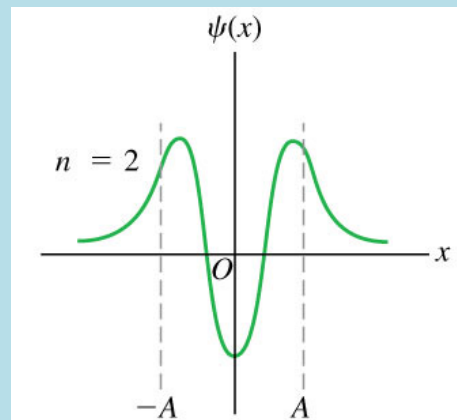
1st excited state

$$h_1(y) = a_1 y, \quad u_1(y) = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

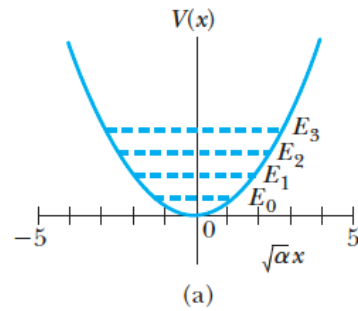
$$n = 2$$

2nd excited state

$$a_2 = \frac{-4}{(2)(1)} a_0$$



$$h_2(y) = (a_0 - 2a_0 y^2), \quad u_2(y) \sim (a_0 - 2a_0 y^2) e^{-\frac{y^2}{2}}$$



$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

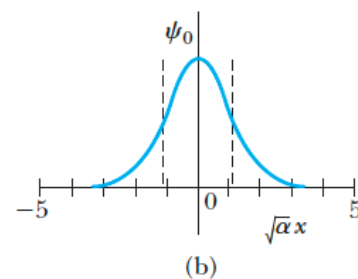
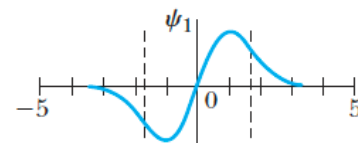
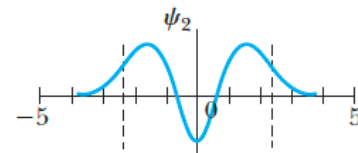
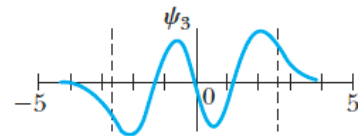
Wave functions

$$u_3(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{\alpha}x) (2\alpha x^2 - 3) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$u_2(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$u_1(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2\alpha} x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$u_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$



能量量子化 Energy Quantization

別忘了！能量本徵函數滿足的性質，SHO的本徵函數也都滿足！

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：

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [c_n \cdot u_n(x)]$$

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

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

分量 c_n 可以寫成態函數與本徵函數的空間積分：

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

$|c_n|^2$ 就是在 $\psi(x)$ 狀態，測量能量時得到結果是 $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ 的機率！

Equation 2.71 has solutions, of course, for *any* value of E (in fact, it has *two* linearly independent solutions for every E). But almost all of these solutions blow up exponentially at large x , and hence are not normalizable. Imagine, for example, using an E that is slightly *less* than one of the allowed values (say, $0.49\hbar\omega$), and plotting the solution: Figure 2.6(a). Now try an E slightly *larger* (say, $0.51\hbar\omega$); the “tail” now blows up in the *other* direction (Figure 2.6(b)). As you tweak the parameter in tiny increments from 0.49 to 0.51, the graph “flips over” at precisely the value 0.5—only here does the solution escape the exponential asymptotic growth that renders it physically unacceptable.³⁶

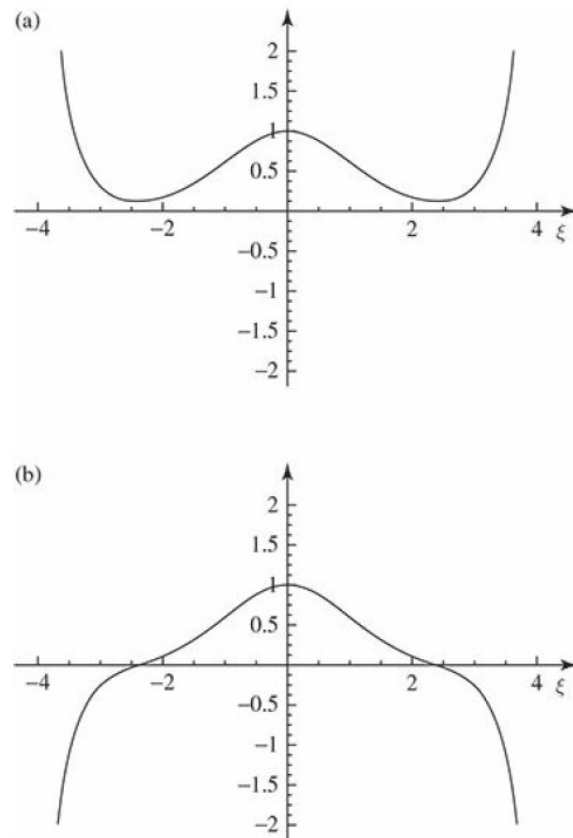
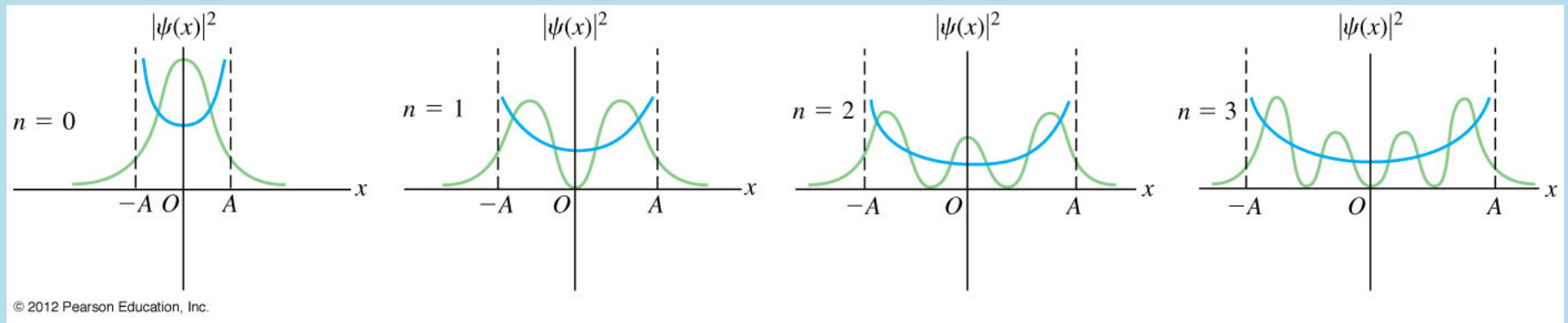
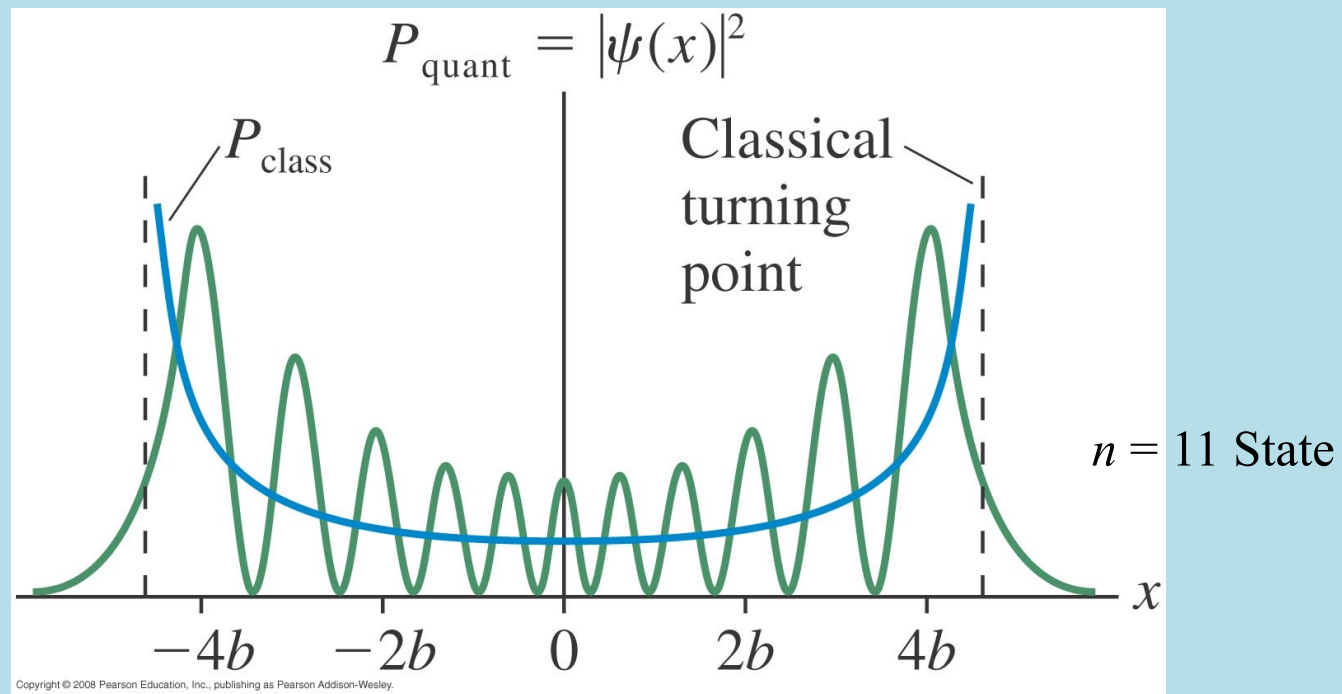


Figure 2.6: Solutions to the Schrödinger equation for (a) $E = 0.49\hbar\omega$, and (b) $E = 0.51\hbar\omega$.

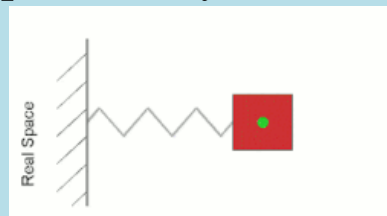
$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} kx^2 - E \right) \psi_E$$



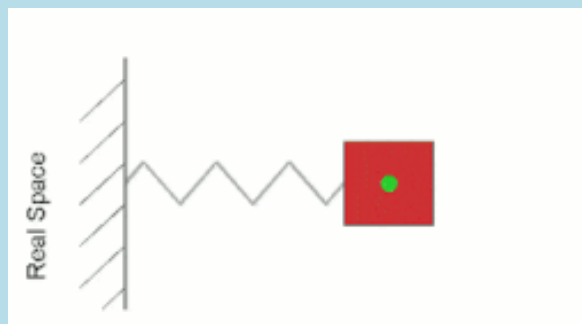
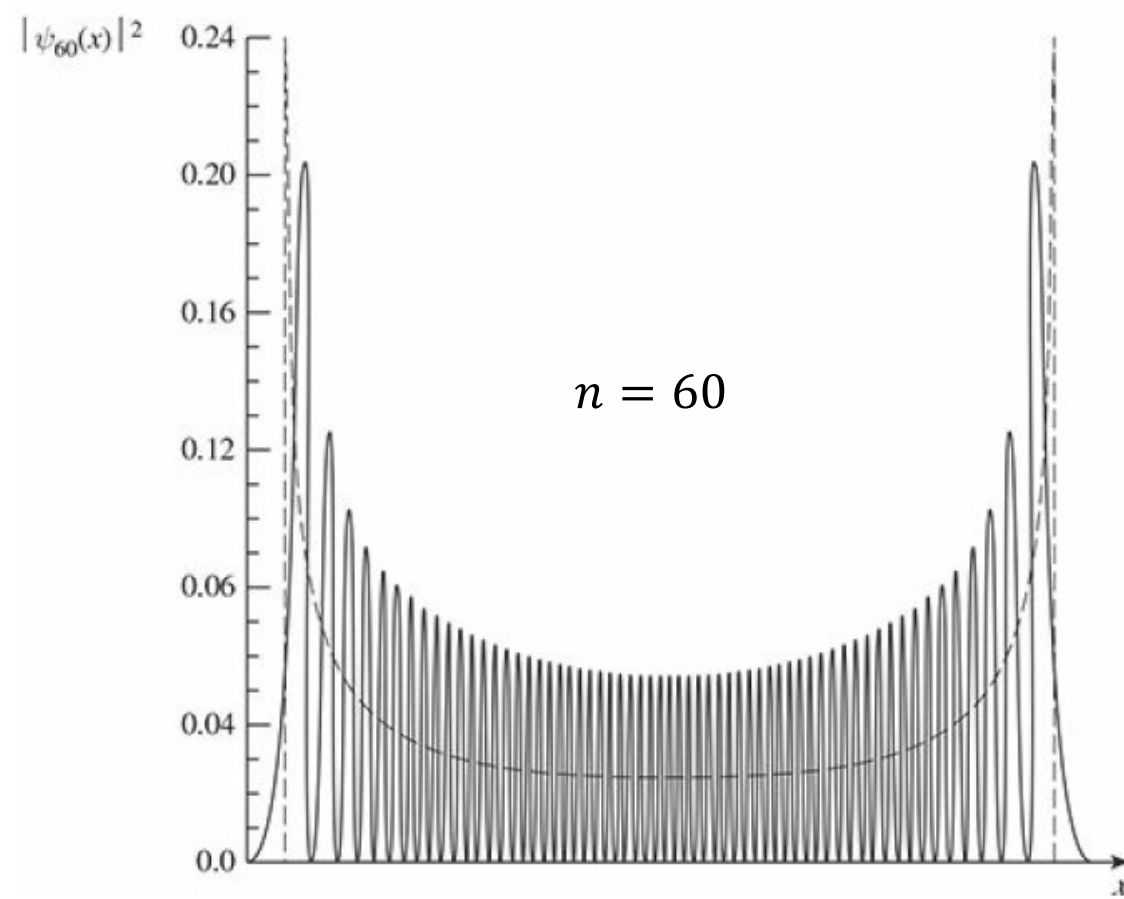
綠線是量子機率分佈，藍線是對應古典振動的位置機率，兩端運動慢，出現機率高。



For large n , the quantum probability is similar to the classical one.

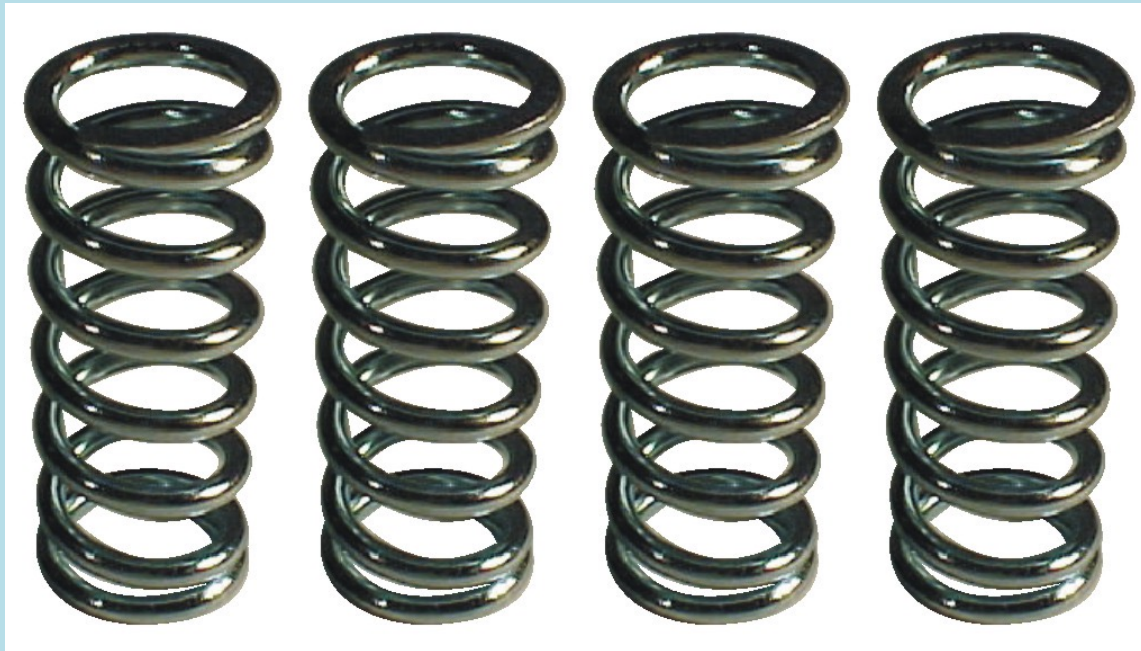


(b)

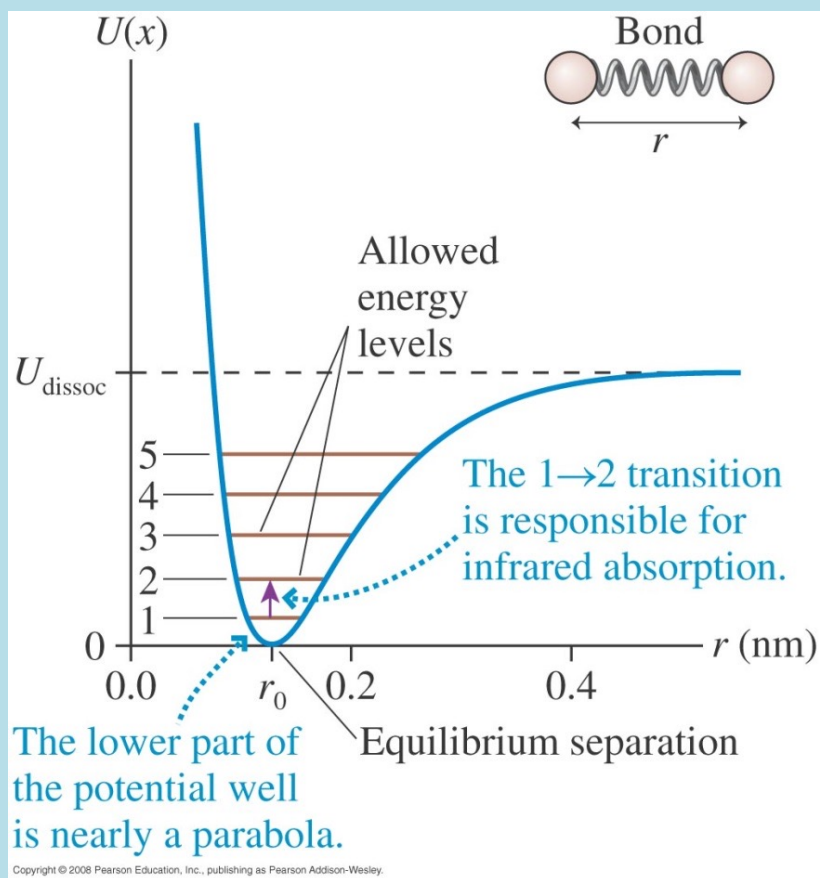


微觀世界有許多彈簧！

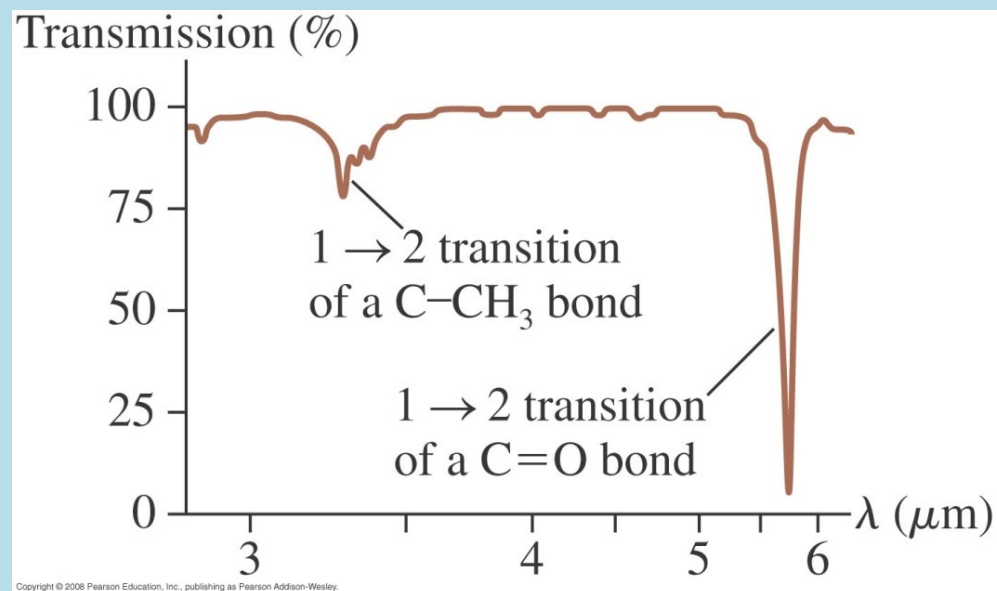
一個力學系統在平衡點附近的小範圍運動，都是簡諧運動！

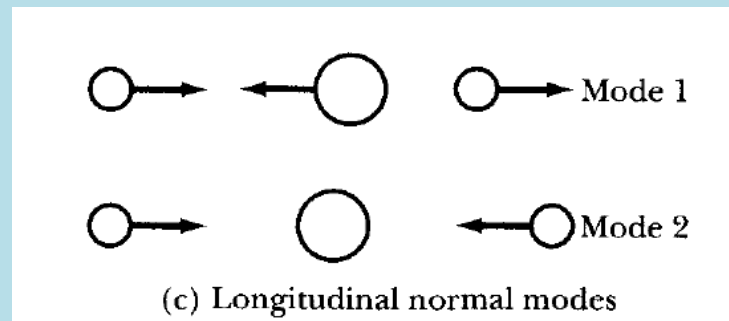
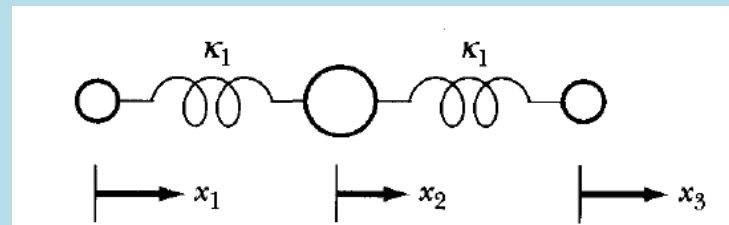
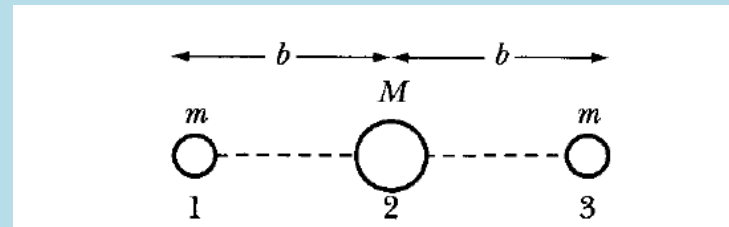


分子的束縛鍵就是一個彈簧！



Molecular Vibration 分子光譜

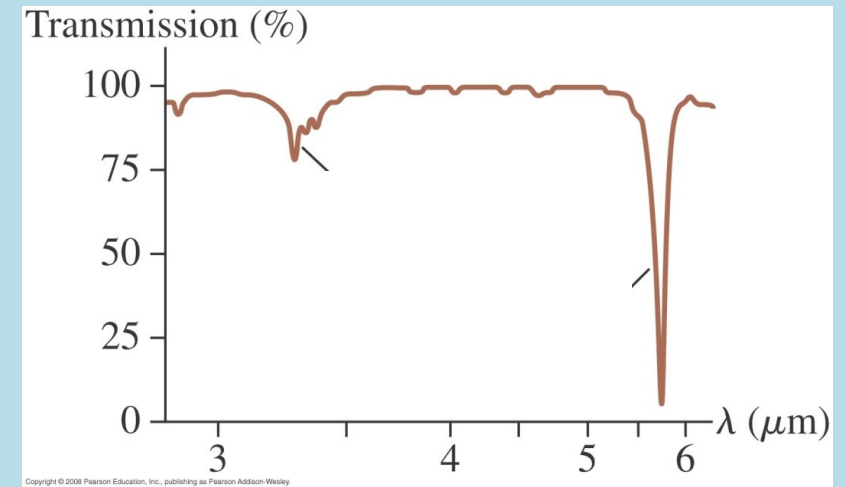
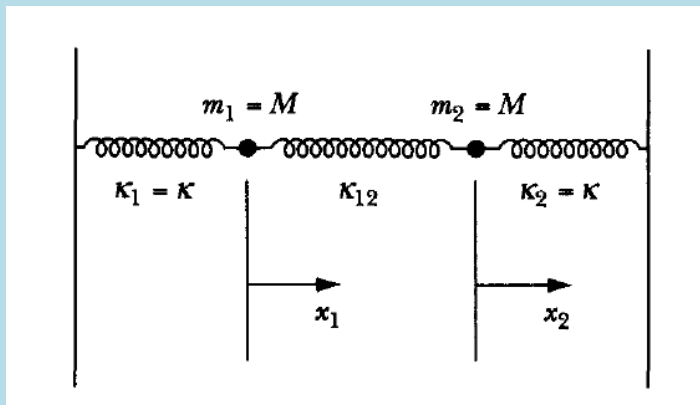
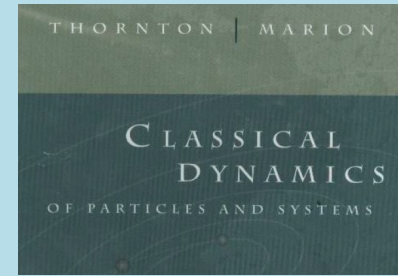




三個原子組成的分子，可以有兩個振盪模式Mode，如同兩條獨立振動的彈簧。

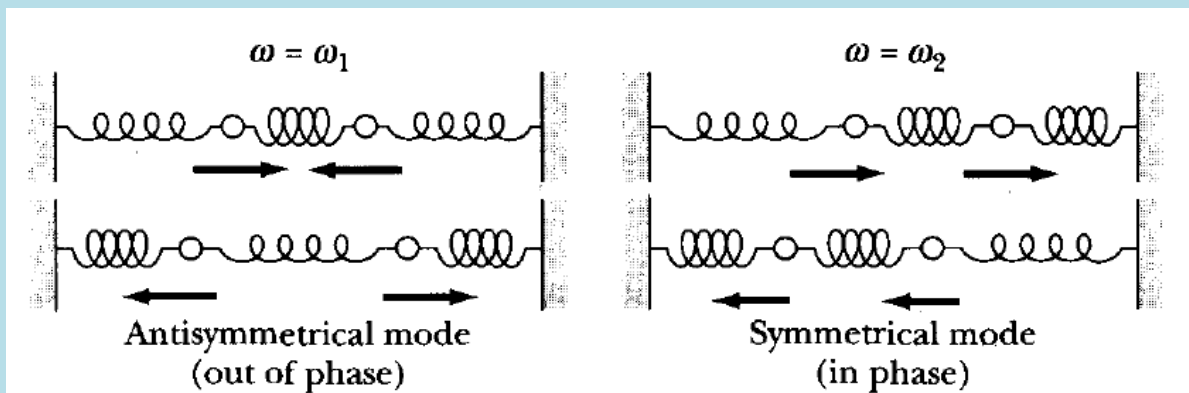
CHAPTER 12

Coupled Oscillations



$$\left. \begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2}(\eta_2 + \eta_1) \\ x_2 &= \frac{1}{2}(\eta_2 - \eta_1) \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} M\ddot{\eta}_1 + (\kappa + 2\kappa_{12})\eta_1 &= 0 \\ M\ddot{\eta}_2 + \kappa\eta_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$



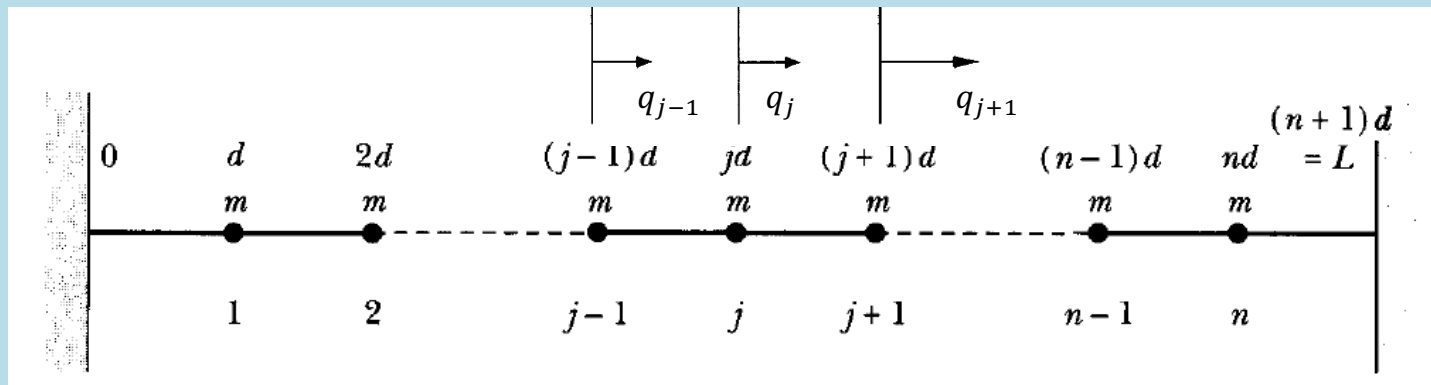
$$\omega_1 = \sqrt{\frac{\kappa + 2\kappa_{12}}{M}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{\kappa}{M}}$$

等於兩條獨立彈簧

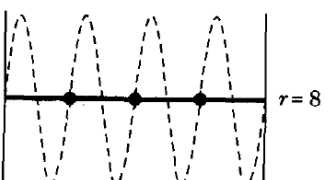
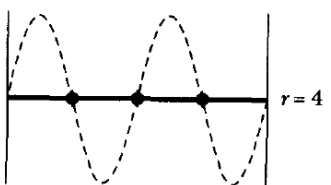
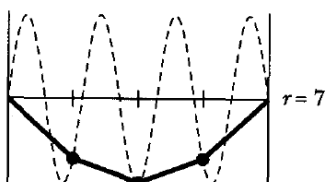
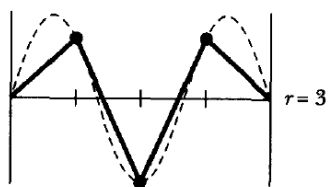
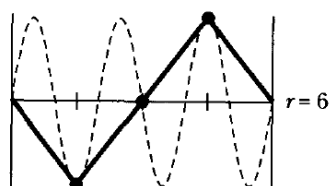
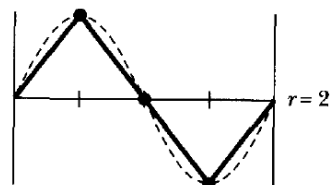
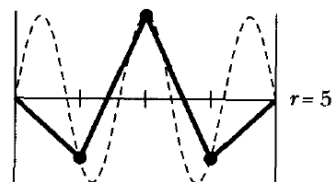
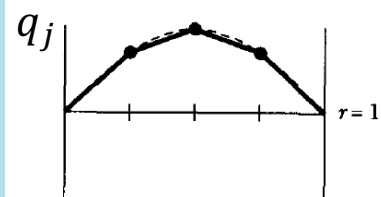
有2個mode。

每一個振動mode對應一條彈簧。

12.9 The Loaded String* 原子晶格的振動波



晶格上原子的前後移動，可以改寫成一個一個獨立的振動模式mode。



每一個振動mode對應一條獨立彈簧。

第 r 個mode的角頻率為： $\omega_r \sim \sin \left[\frac{r\pi}{2(n+1)} \right]$

在第 r 個mode，第 j 個粒子的振幅可以寫成：

$$q_j \sim \sin \left(j \frac{r\pi}{n+1} \right) = \sin \left[jd \frac{r\pi}{(n+1)d} \right]$$

很像駐波。

重新定義變數： x 為第 j 個粒子的位置。

$$x \equiv jd \quad k \equiv \frac{r\pi}{(n+1)d} \quad r \text{ 以 } k \text{ 取代。}$$

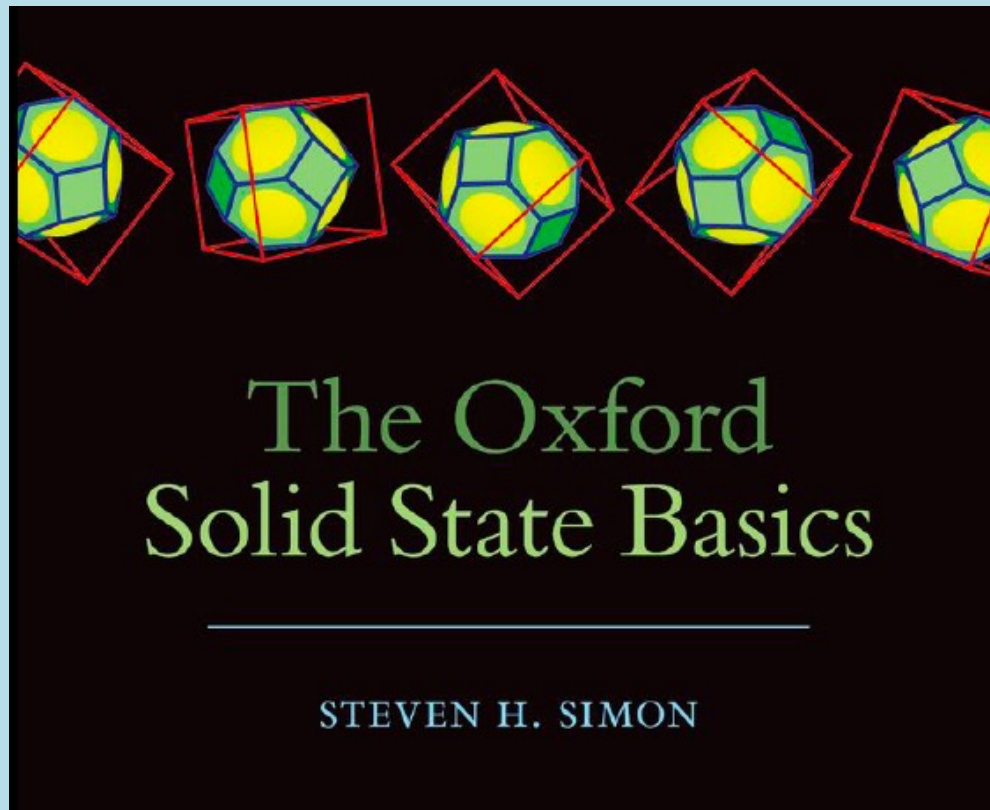
以上可以改寫成：

$$q_j \rightarrow q(x) = \sin(kx)$$

$$\omega_r \sim \sin \left[\frac{r\pi}{2(n+1)} \right] \rightarrow \omega(k) \sim \sin \frac{kd}{2}$$

每一角波數 k 模式對應一條彈簧！





Vibrations of a One-Dimensional Monatomic Chain

9

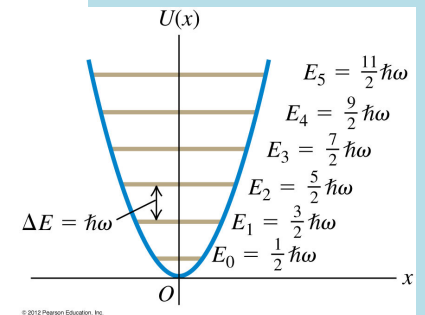
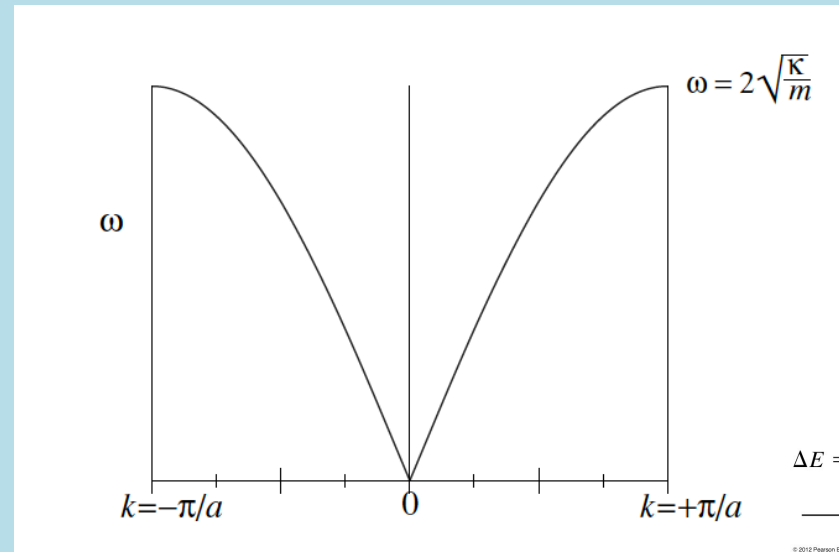
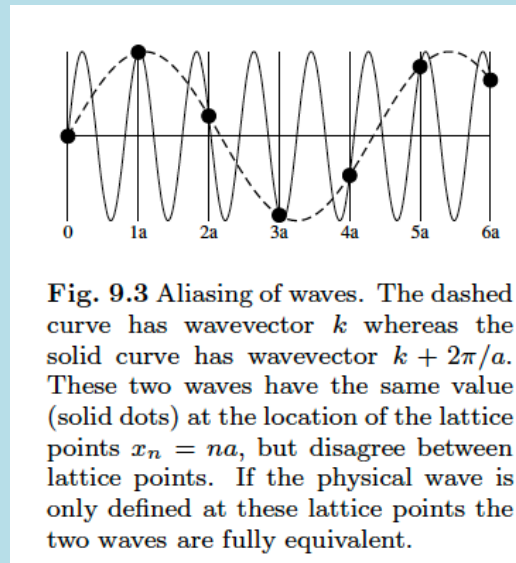
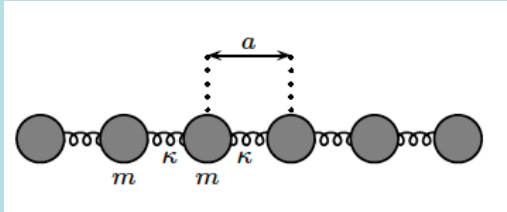
In Chapter 2 we considered the Boltzmann, Einstein, and Debye models of vibrations in solids. In this chapter we will consider a more detailed model of vibration in a solid, first classically, and then quantum-

n 很大時， k 就成為連續變數。其實這就是角波數。

模式 k 時，在位置 x 的粒子的運動可以解出：

$$q(x, t) \sim \sin(kx) e^{i\omega(k)t}$$

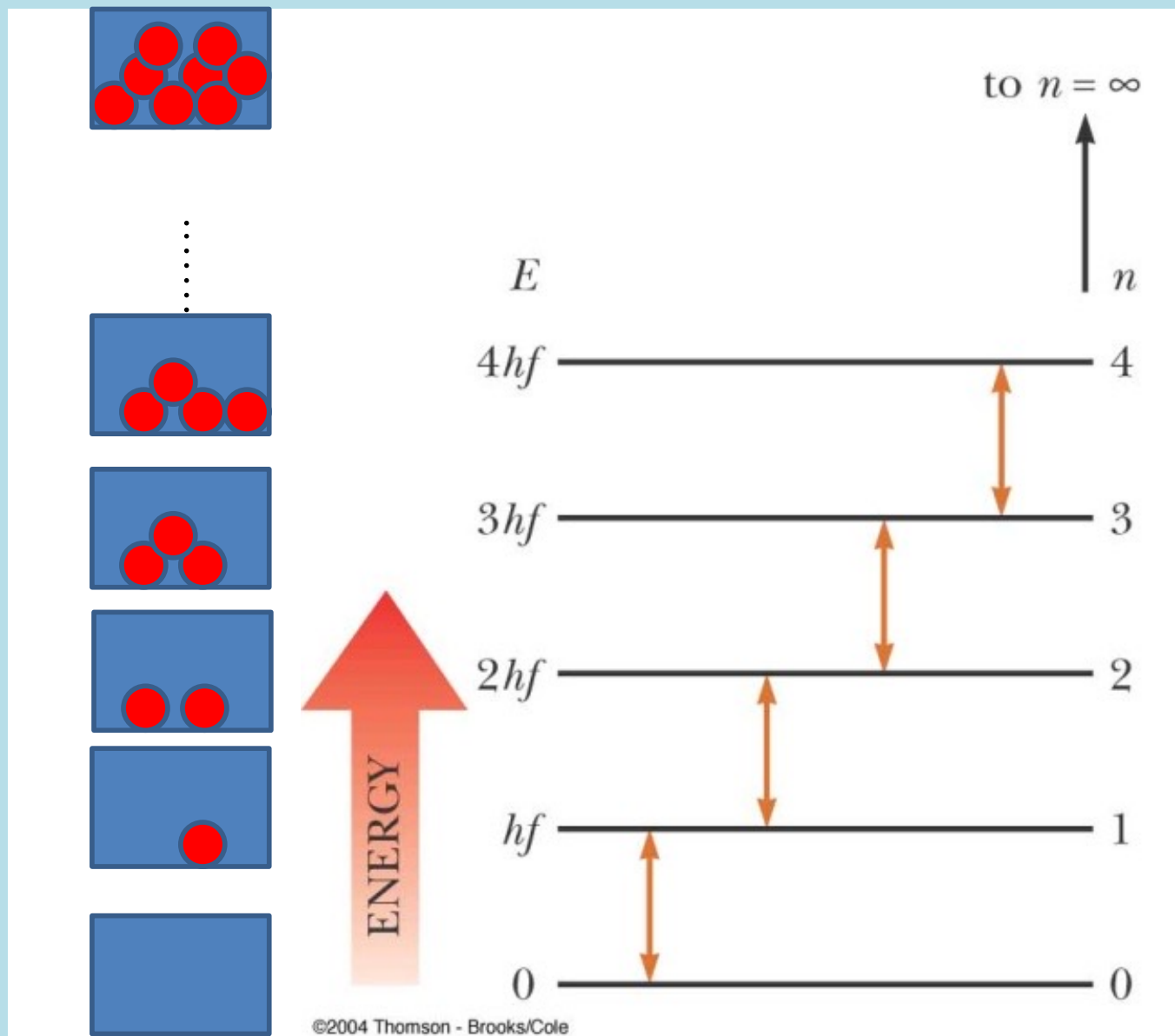
$$\omega(k) \sim \sin \frac{kd}{2} \quad \text{晶格振動波的色散關係}$$



晶體中原子的振動，可以找到一系列如彈簧的模式。

這些模式一般如縱波平面波一般，有角波數 k 及對應的角頻率 ω 。

如同量子彈簧，每一模式的能量皆為量子化。



每一角波數 k 模式的能階像極了在盒子中一個個裝入能量相同的粒子。

量子



粒子

粒子數

$$n = \frac{E}{\hbar\omega(k)}$$

這就稱為聲子 **phonon**：量子彈簧的激發態！



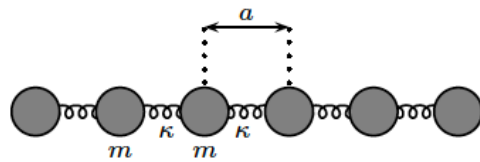


Fig. 9.1 The one-dimensional monatomic harmonic chain. Each ball has mass m and each spring has spring constant κ . The lattice constant, or spacing between successive masses at rest, is a .

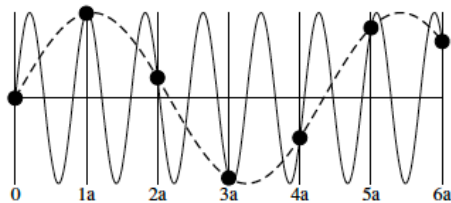


Fig. 9.3 Aliasing of waves. The dashed curve has wavevector k whereas the solid curve has wavevector $k + 2\pi/a$. These two waves have the same value (solid dots) at the location of the lattice

9.3 Quantum Modes: Phonons

We now make a rather important leap from classical to quantum physics.

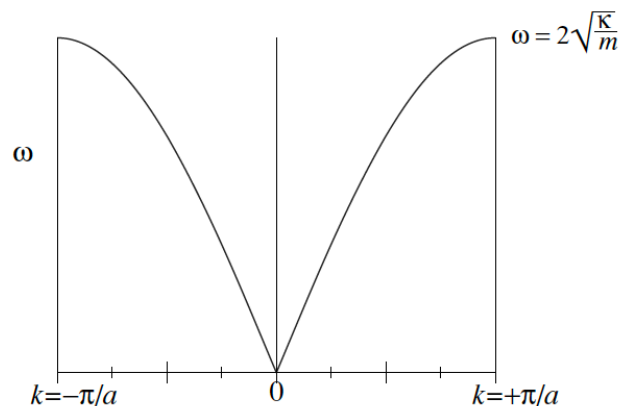
Quantum Correspondence: If a classical harmonic system (i.e., any quadratic Hamiltonian) has a normal oscillation mode at frequency ω the corresponding quantum system will have eigenstates with energy

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (9.7)$$

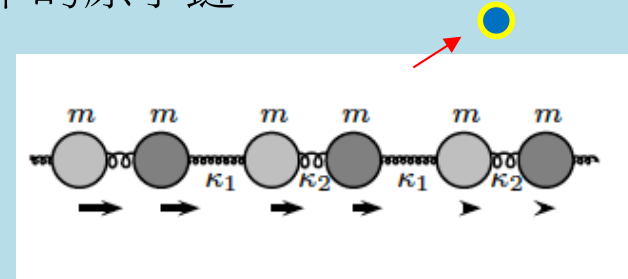
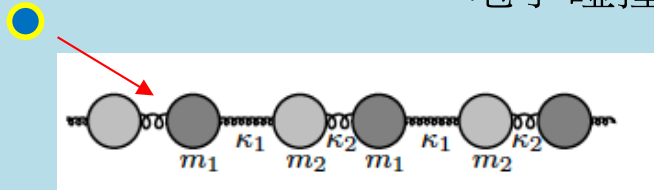
Presumably you know this well in the case of a single harmonic oscillator. The only thing different here is that our harmonic oscillator can be a collective normal mode not just the motion of a single particle. This quantum correspondence principle will be the subject of Exercises 9.1 and 9.7.

Definition 9.1 A *phonon* is a discrete quantum of vibration.⁸

This is entirely analogous to defining a single quantum of light as a photon. As is the case with the photon, we may think of the phonon as actually being a particle, or we can think of the phonon as being a quantized wave.

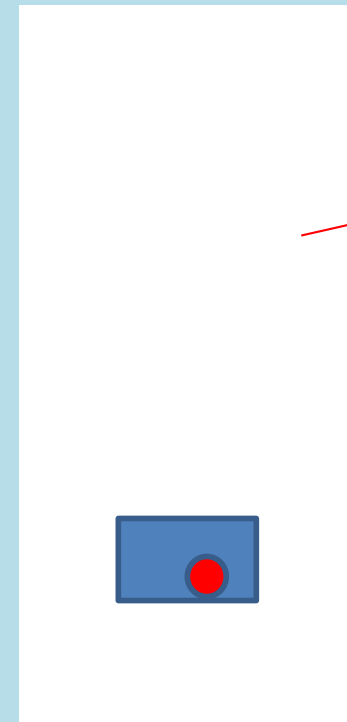
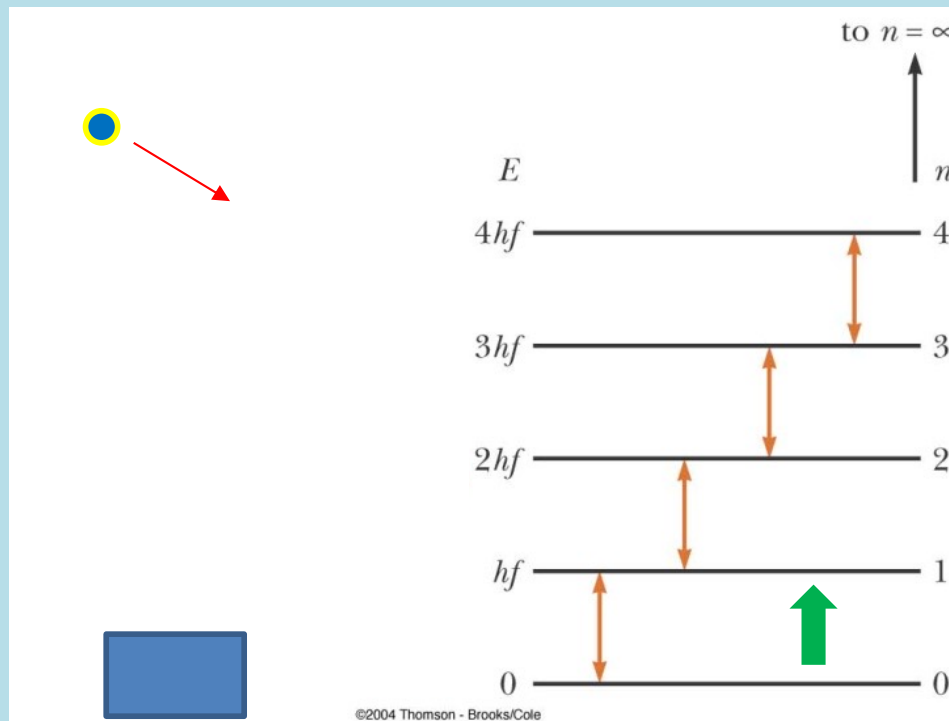


電子碰撞晶體中的原子鏈



等同

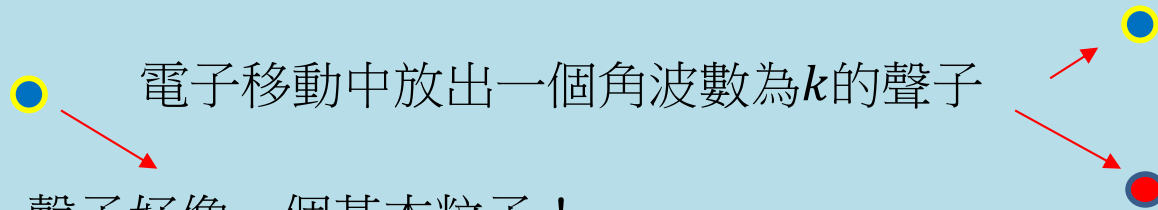
電子碰撞激發某個模式 k 由 $n = 1$ 定態躍遷到 $n = 2$ 定態。



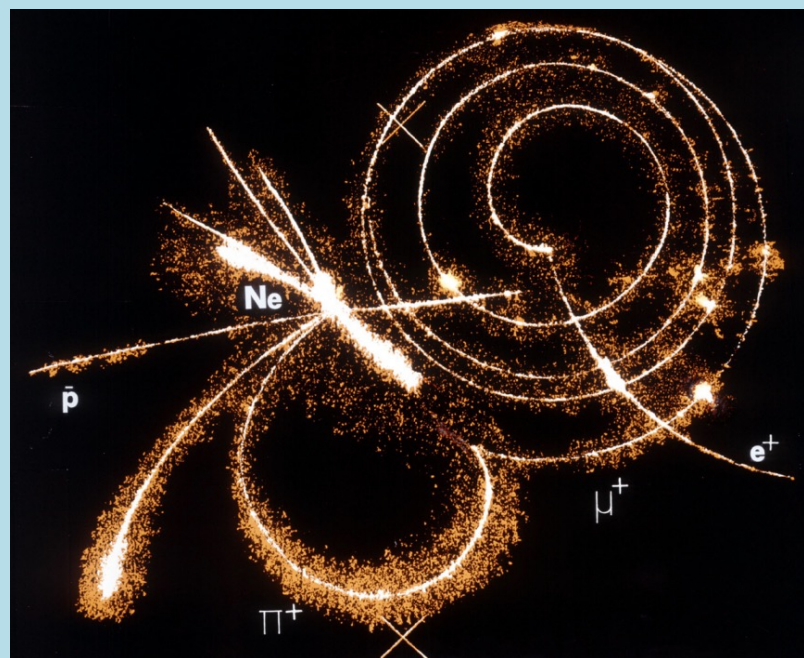
等同

電子移動中放出一個角波數為 k 的聲子

聲子好像一個基本粒子！



量子彈簧不是彈簧，而是可以產生、可以消滅的粒子的系統。

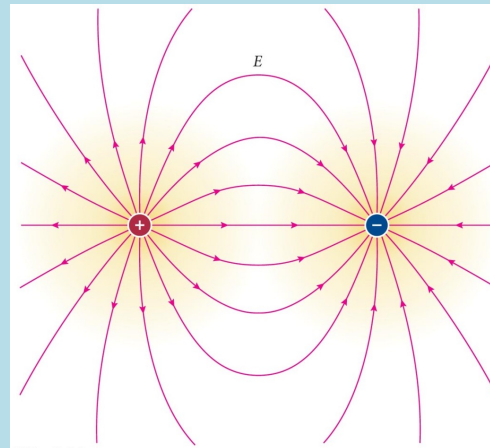


那基本粒子如電子，可不可能看成聲子呢？

基本粒子如電子，可不可能看成是量子彈簧的激發態呢？

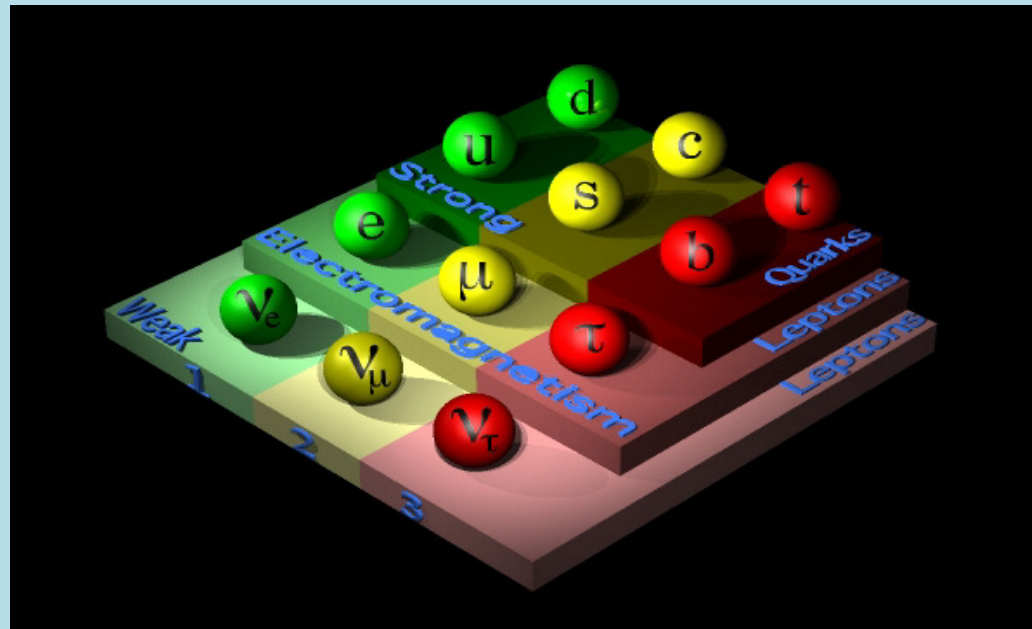
當然這時的彈簧就不能是原子的晶格。

但我們早已熟悉、真空中場的擾動，也可看成一個一個的彈簧的組合！

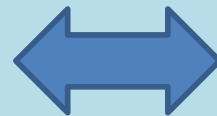


如果場也量子化了，這就稱為量子場，激發態就會是一個個基本粒子。

每一個基本粒子都對應一個量子場



電子



電子場

u 夸克

u 夸克場

描述可產生可消滅的粒子的理論：量子場論！

我們的宇宙是由彈簧組成的



Delta Potential

是否有 $E < 0$ 的解？

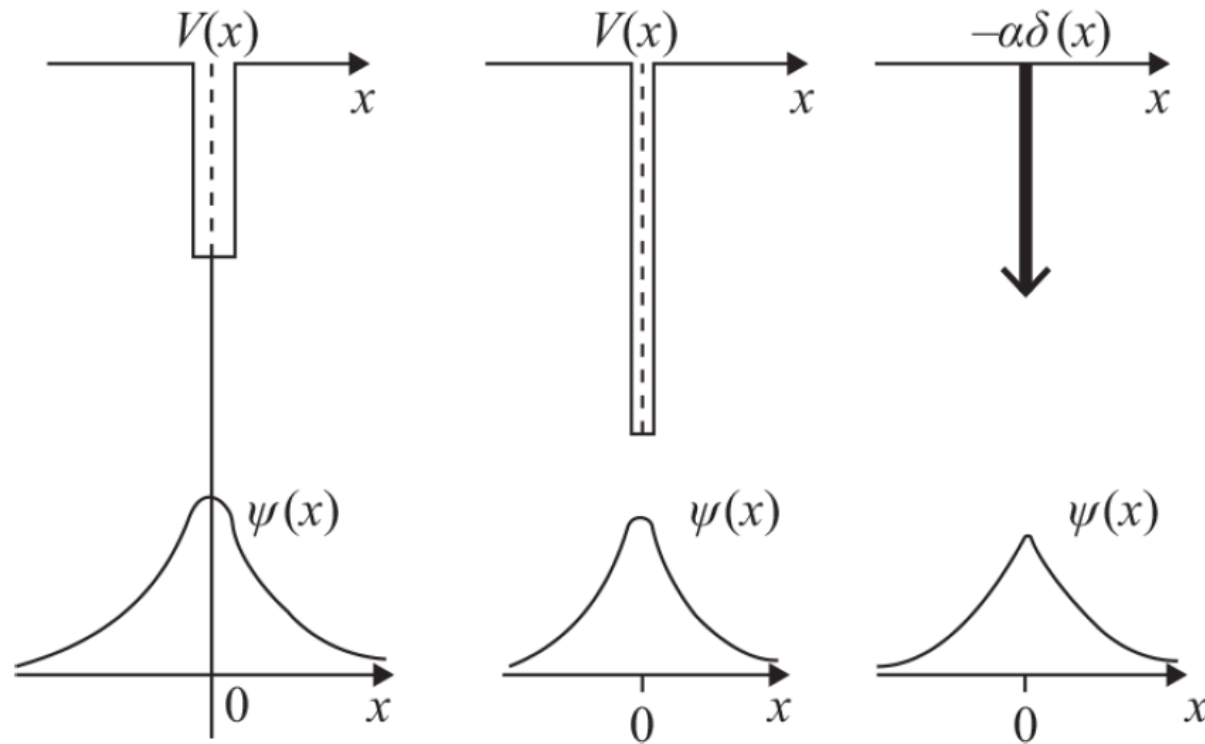
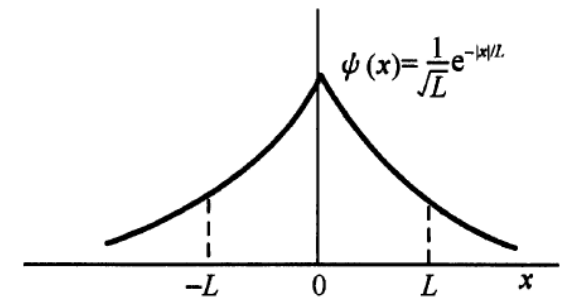


Figure 6.9

The delta function potential as the limit where the finite square well becomes narrower and deeper simultaneously. We expect to get a wave function with a discontinuous derivative.



ψ' 不連續。有一束縛態解。

$$\psi(x) = A e^{-\kappa|x|}.$$

Periodic Potential

例 考虑下列周期方势场(周期 $a+b$)中粒子(图 3.32),

$$V[x + n(a+b)] = V(x)$$

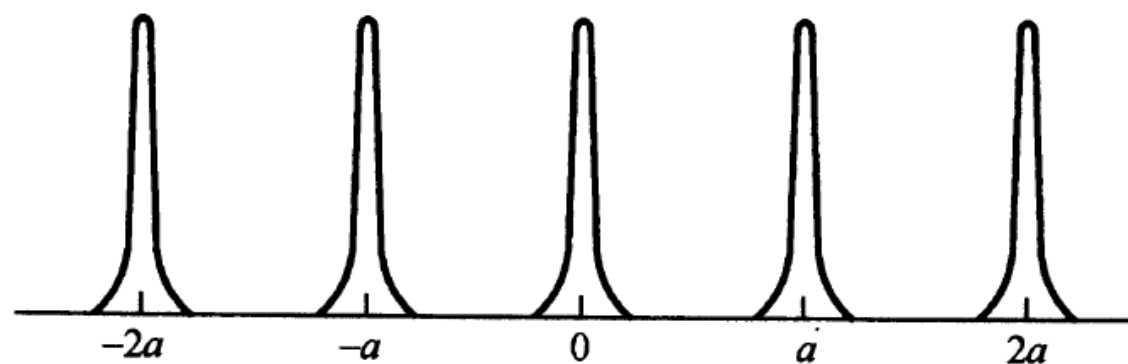
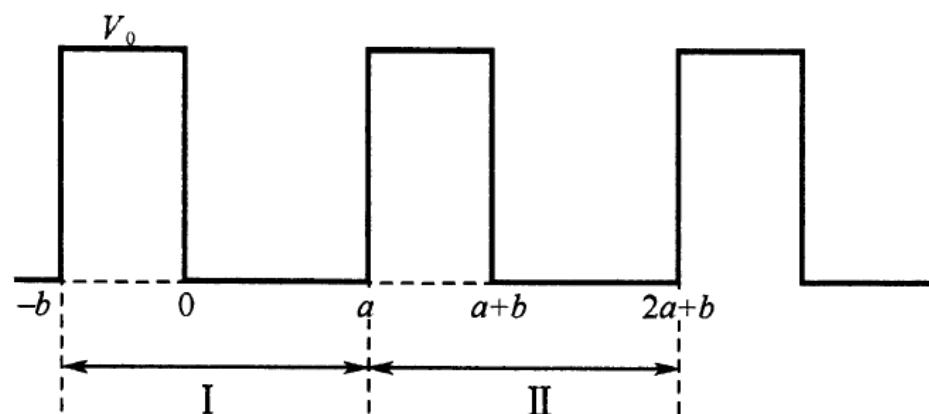


图 3.33 Dirac 梳