量子力學的原則完整版

可疊加，組成一無限維向量空間！

滿足歸一化條件。

某瞬間時刻的狀態 $\longrightarrow$ 狀態函數 $\psi(x)$

可測量的物理量 $\longrightarrow$ 運算子 $\hat{A}$

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

有古典對應的物理量，就直接將位置算子及動量算子代入同樣的數學形式：

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

就得到量子力學中對應的算子。

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

把對應的算子放入此式，就可得到測量期望值。

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

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

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

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

狀態函數隨時間的演化由漢米爾頓量來負責！

薛丁格方程式

運用以上的原則：

薛丁格方程式的可分離separable解，滿足與時間無關的薛丁格方程式：

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

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

這些是描述Stationary State定態的解ψ_E。定態解的所有測量期望值與時間無關。

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

左邊就是量子力學中對應的Hamiltan運算子，此式可以寫成：

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

也就是：

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

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

$$A\psi=\lambda\psi, \tag{6.1}$$

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。

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

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！ $\Delta H = 0$

這樣的能量的本徵函數通常有一系列：$u_n, n = 1,2,\cdots$！

我們發現任一狀態函數ψ可以以一系列能量的本徵函數u_n展開！

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

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

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

能量的期望值等於：

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{H}\psi(x) = \sum_n E_n \cdot |c_n|^2$$

測量結果　機率

展開分量c_n的絕對值平方，就是對$\hat{H}$測量得到結果是E_n的機率。

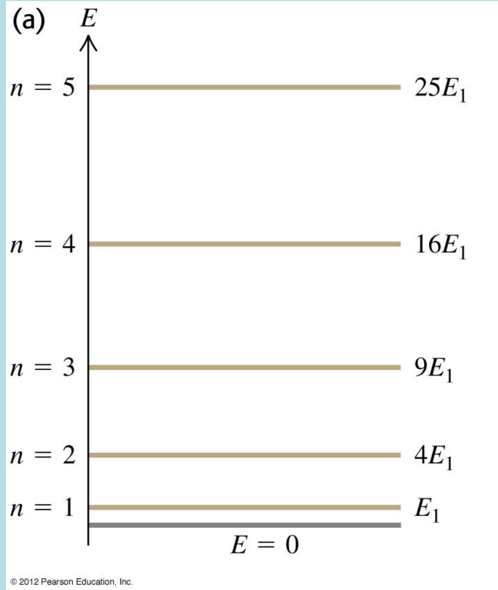
這強烈暗示測量能量時，得到結果只能是E_n其中之一！不會測到其他的值。

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！

Measurement Theorem 測量定理

3. Consider an electron in a simple harmonic potential $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. The stationary states $u_n(x)$ are the eigenfunctions corresponding to the eigenvalues $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$. For example:

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \equiv c e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \qquad u_2(x) = c\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Here we use the notation $c = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ to simplify the expression. Assume the wavefunction of the electron at $t = 0$ is:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{3}}u_0(x) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}u_2(x)$$

Its total probability has been normalized to one (You can check this after exam).

B. At $t = 0$, make an energy measurement. What are the values it could possibly give? What are the corresponding probabilities? Do the probabilities add up to one? (10)

B. The wave function is a superposition of the eigenfunction u_0, u_2 of eigenvalues E_0, E_2, with amplitudes $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} c_2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}, c_n = 0, n \neq 0,2$. The energy could only be $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ or $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$. The corresponding probabilities are the square of the magnitudes c_0 and c_2: $\frac{1}{3}$ and $\frac{2}{3}$ ∘ They add up to one. The expectation value of energy is $\langle E\rangle = \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_2 = \frac{11}{6}\hbar\omega$.

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{3}}u_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}u_1(x)$$

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{H} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}}u_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}u_1(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \left[\sqrt{\frac{1}{3}}u_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}u_1(x)\right] \cdot \left[E_0\sqrt{\frac{1}{3}}u_0(x) + E_1\sqrt{\frac{2}{3}}u_1(x)\right]$$

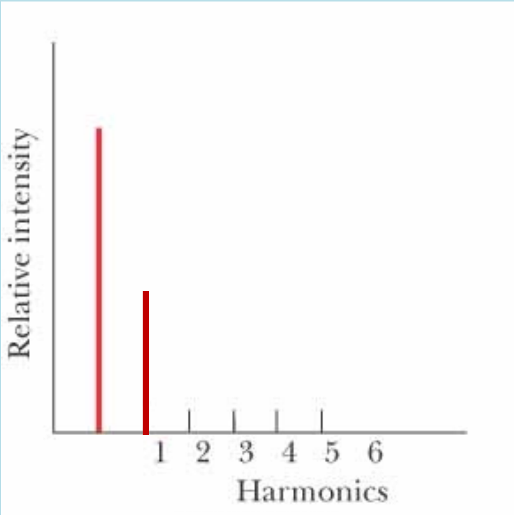
$$= \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_1 = |c_0|^2 E_0 + |c_1|^2 E_1$$

$$\frac{1}{3} + \frac{2}{3} = 1$$

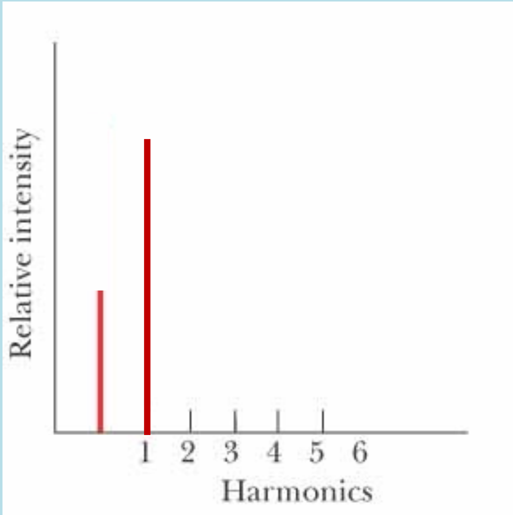
機率

測量結果

$$\sqrt{\frac{2}{3}}u_0(x)+\sqrt{\frac{1}{3}}u_1(x)$$



$$\sqrt{\frac{1}{3}}u_0(x)+\sqrt{\frac{2}{3}}u_1(x)$$



這兩個不同的狀態，可以測到的能量值竟然完全一樣：E_0, E_1。

機率的分佈不同！2: 1與1: 2。

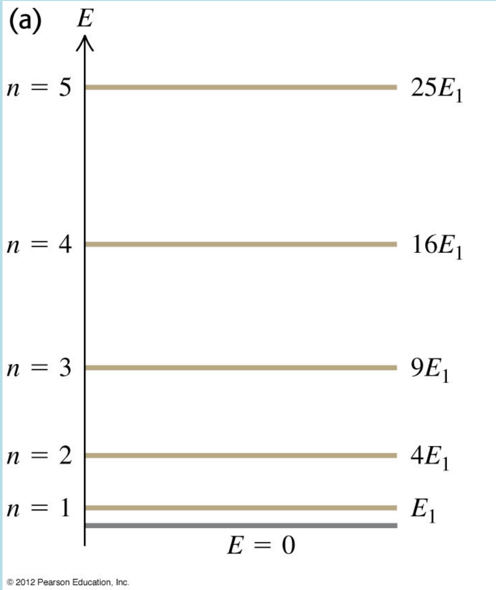
$\psi(x)$

$\hat{A}$

不同的狀態下，機率的分佈不同！
但可能得到的測量結果卻一樣！

$|c_n|^2, n = 1,2,3 \cdots$

描述測量的算子是很有個性的！
由它來決定測量的結果有哪些可能！



算子有它的堅持！

解eigenfunction、例如能量算子的定態，是在決定你測量時會得到什麼結果。

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，

測量第一次完畢後，狀態已經不會再是結果不確定的狀態$\psi(x)$，

而是結果完全確定的本徵函數$u_n(x)$。

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

$$\psi(x) \xrightarrow[\hat{H}\to E_n]{} u_n(x)$$

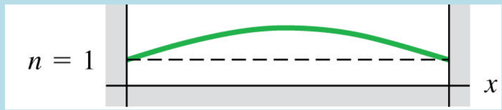
在特定狀態，每一個初次測量結果不會是確定的！

崩潰變成的態也就不確定。

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

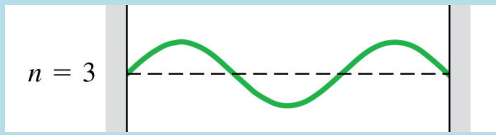
$E = E_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}$

$P_1 \sim 1$



$E = E_3$

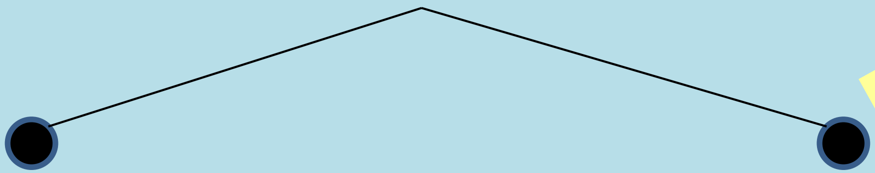
$P_3 \sim \frac{1}{81}$



$\cdots$

但不會測到E_{2m}。

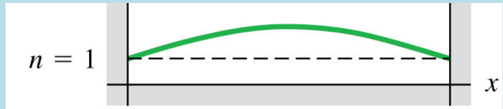
這個結果不只適用於能量，對任何測量物理量如位置、動量、角動量都成立。



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

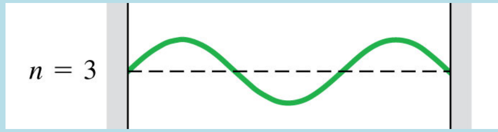
$E=E_1=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}$

$P_1\sim 1$



$E=E_3$

$P_3\sim\frac{1}{81}$

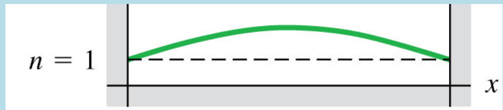


$\cdots$

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

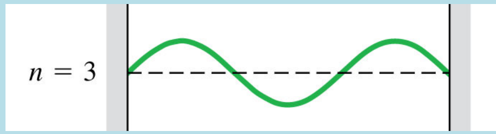
$E=E_1=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}$

$P_1\sim\frac{1}{81}$



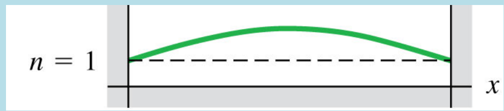
$E=E_3$

$P_3\sim 1$



$\cdots$

兩個不同的狀態，測到一的樣能量值，如E_1，就崩潰到同樣狀態。



4 Basic Assumptions of QM

A1. The wave function is the complete description of a quantum system.

A2. Hermitian operators are observables.

A3. The measurement axiom.

A4. Time evolution via the Schrödinger equation.

Measurement axiom. *If we measure the Hermitian operator $\hat{Q}$ on the (normalized) state Ψ, the possible outcomes for the measured values are the eigenvalues q_1, q_2, … of $\hat{Q}$ associated with the orthonormal eigenvectors ψ_1, ψ_2, …. With the state written as $\Psi = \sum_i \alpha_i \psi_i$, the probability p_i of measuring q_i is given by*

$$p_i = |\alpha_i|^2. \tag{5.3.26}$$

After the outcome q_i, the state of the system becomes

$$\Psi = \psi_i. \tag{5.3.27}$$

This is called the collapse of the wave function. If the spectrum of $\hat{Q}$ is degenerate after measuring a degenerate eigenvalue, the wave function collapses in the associated degenerate subspace (see remark 4 below).

狀態以定態解展開還提供了對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：

$$\Psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n u_n(x)$$

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。

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

這一展開式竟然也適用於位能下薛丁格方程式的普遍解法：

首先， 位能下薛丁格方程式會有一系列的定態解：

$$\Psi_n(x,t) = u_n(x) \cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

定態解就是時間部分與空間可以分離的解！

將$t = 0$ 時的波函數，即起始條件，對定態解u_n展開如下：

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x)$$

$t = 0$時此狀態可以視為定態的如上疊加，

而接下來定態隨時間的演化，就是在u_n上乘$e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$，這滿足位能薛丁格方程式。

乘完之後依同樣方式疊加，整個波函數也就滿足薛丁格方程式。

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

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。

這個程序原則上適用於任何位能。

C. For a later time $t = t_0 > 0$, write down the wave function $\psi(x, t_0)$. There is no need to simplify the answer. Calculate the probability density at the origin $x = 0$ when $t = t_0$, in terms of $\hbar, \omega, c$. (10)

Hint: $|A+B|^2 = (A^* + B^*)(A+B) = |A|^2 + |B|^2 + A^*B + B^*A$

C. $t = 0$時此狀態可以視為定態$u_{0,2}(x)$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。因此

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}} u_0(x) e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} u_2(x) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\text{。}$$

注意兩個定態的能量E_0, E_2是不一樣的。

The wavefunction at the origin $x = 0$ equals

$$\psi(0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{3}} c e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{c}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t_0} = \frac{c}{\sqrt{3}} \left(e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} - e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t_0} \right)$$

The probability density:

$$|\psi(0,t_0)|^2 = \frac{c^2}{3} \left| e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} - e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t_0} \right|^2$$

$$= \frac{c^2}{3} \left\{ \left| e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} \right|^2 + \left| e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t_0} \right|^2 - e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t_0} e^{i\frac{E_2}{\hbar}t_0} - e^{i\frac{E_0}{\hbar}t_0} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t_0} \right\}$$

$$= \frac{c^2}{3} \left\{ 1 + 1 - e^{-i\frac{E_0 - E_2}{\hbar}t_0} - e^{i\frac{E_0 - E_2}{\hbar}t_0} \right\} = \frac{c^2}{3} \left\{ 2 - 2\cos\frac{E_0 - E_2}{\hbar} t_0 \right\}$$

$$= \frac{c^2}{3} \{ 2 - 2\cos 2\omega t_0 \}$$