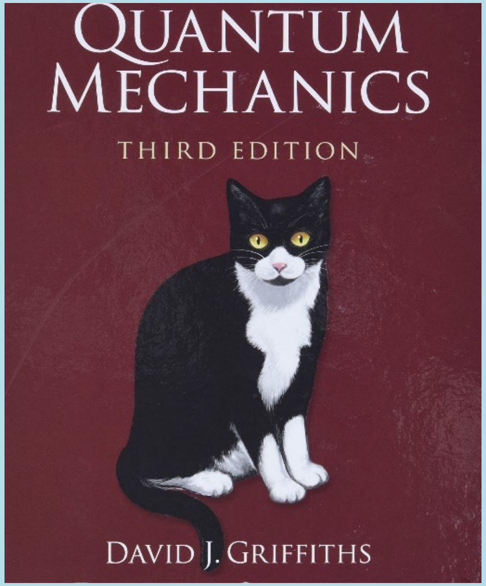
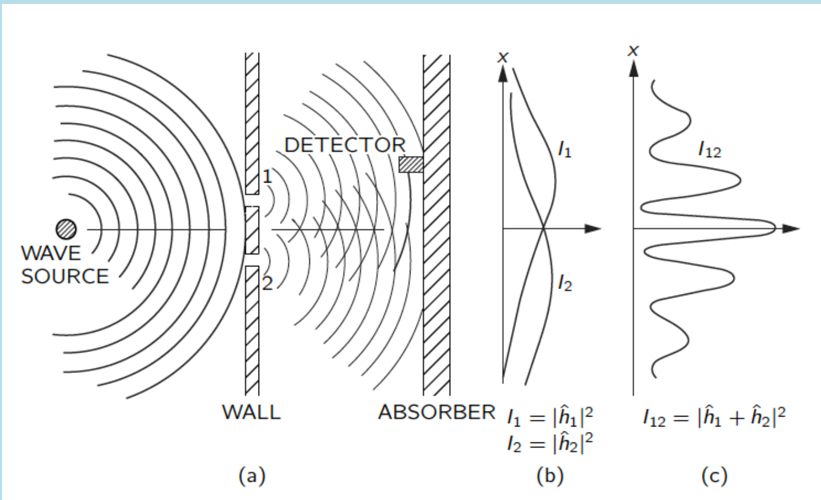


$\psi(x)$

兩個量子狀態的疊加，就是線性組合，依舊是一可能的量子狀態！

一個電子所有可能的量子狀態、即狀態函數，組成一線性空間。



這個線性空間的數學結構，在我們研究能量的本徵函數u_n時，很明顯表現出來：

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：

$$\psi(x) = \sum_n [c_n \cdot u_n(x)] \quad \Rightarrow \quad \vec{a} = \sum_{m=1}^{l} a_m \hat{\imath}_m$$

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn} \quad \Rightarrow \quad \hat{\imath}_m \cdot \hat{\imath}_n = \delta_{mn}$$

分量c_a可以寫成態函數與本徵函數的空間積分:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x) \quad \Rightarrow \quad a_m = \vec{a} \cdot \hat{\imath}_m$$

把狀態視為向量，展開定理與正交定理，就如同向量空間分析一模一樣！

一系列本徵函數u_n似乎類比於一組基底。

任一狀態函數依疊加係數c_n可以此u_n作展開，如同向量以分量對基底展開。

如同向量，狀態函數的資訊就保留在分量中。

展開定理：任一狀態ψ可以u_n作展開。

$$\psi(x) = \sum_n [c_n \cdot u_n(x)] \quad \Rightarrow \quad \vec{\psi} = \sum_{m=1}^{l} c_m \hat{\imath}_m$$

正交定理：本徵函數彼此正交。

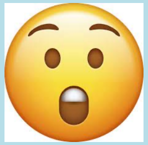
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn} \quad \Rightarrow \quad \hat{\imath}_m \cdot \hat{\imath}_n = \delta_{mn}$$

分量c_a可以寫成態函數與本徵函數的空間積分:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x) \quad \Rightarrow \quad c_m = \vec{\psi} \cdot \hat{\imath}_m$$

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：

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



以上適用於任何算子的本徵態

花燈由支架支撐展開，所有可能的量子狀態是由本徵函數為支架展開！

我們更近一步發現，此線性空間如同向量空間一樣可以有內積的計算。

兩個函數乘積的積分滿足線性代數中兩向量的內積的所有性質（如分配律）！

大膽引進一符號$\langle\psi,\phi\rangle$來表達兩個狀態函數ψ,ϕ的此一內積：

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

這個內積在前換互換後，會變為複數共軛。

$$\langle\psi,\phi\rangle^* = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^* \cdot \phi\right)^* \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi^* \cdot \psi = \langle\phi,\psi\rangle$$

可見一個狀態函數ψ與自己的內積一定是實數，

$\langle\psi,\psi\rangle^* = \langle\psi,\psi\rangle$ 這對應向量的長度平方。

這個內積可以用來書寫一個狀態函數ψ的歸一化條件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)^* \cdot \psi(x) \equiv \langle\psi,\psi\rangle = 1$$

ψ只能是單位向量！向量長度需為1。

用這一內積符號：$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)^* \cdot \phi(x) \equiv \langle \psi, \phi \rangle$$

如此u_n的正交定理可以簡化寫成：

$$\int_0^a dx \cdot u_n^*(x) u_m(x) = \delta_{mn} \longrightarrow \langle u_n, u_m \rangle = \delta_{mn}$$

函數展開的分量可以寫成 ：

$$c_n = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) \psi(x) \longrightarrow c_n = \langle u_n, \psi \rangle$$

u_n就是正交基底。

這是驚人的簡化，省去書寫積分的麻煩。

更重要、它揭露了量子狀態、即狀態函數的數學結構：有內積的向量空間。

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$$

$$\int_0^a dx \cdot u_n^*(x)\psi(x) = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x)\left[\sum_{m=1}^{\infty}\right.$$

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

用新的符號推導展開係數，過程相同，卻極簡。而且與向量分析完全一致。

$$\langle u_n, \psi\rangle = \left\langle u_n, \sum_{m=1}^{\infty} c_m u_m(x)\right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_m \langle u_n, u_m\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_m \delta_{mn} = c_n$$

$$c_n = \langle u_n, \psi\rangle$$

期望值的書寫也可以用新的內積。

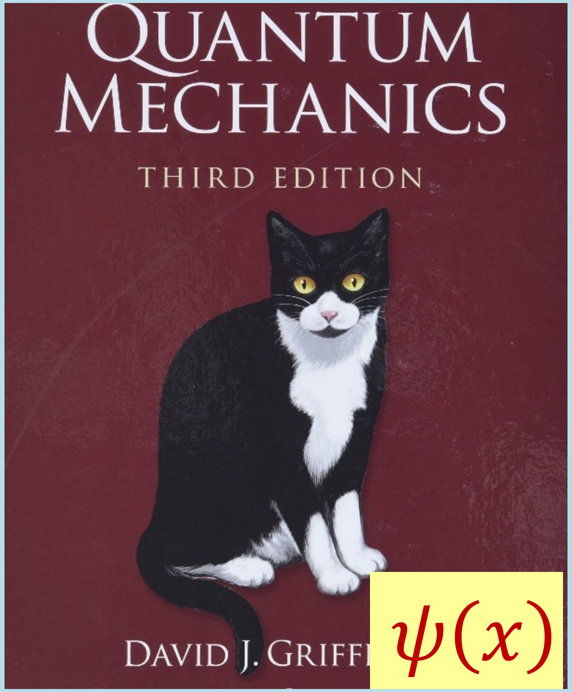
連期望值都可以寫成：

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

展開定理的證明與計算更簡單：

$$\langle H\rangle = \langle \psi, \hat{H}\psi\rangle = \left\langle \psi, \hat{H}\sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \langle \psi, \hat{H} u_n\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \langle \psi, u_m\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \langle u_n, \psi\rangle^* = \sum_{n} E_n c_n c_n^* = \sum_{n} E_n \cdot |c_n|^2$$



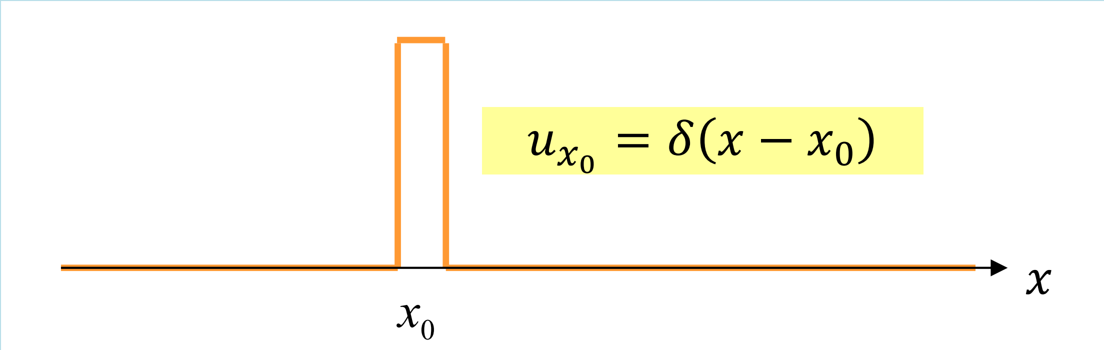
$\psi(x)$

所有可能的量子狀態、即狀態函數組成的數學結構：

有內積的、無限維的向量空間：Hilbert Space。

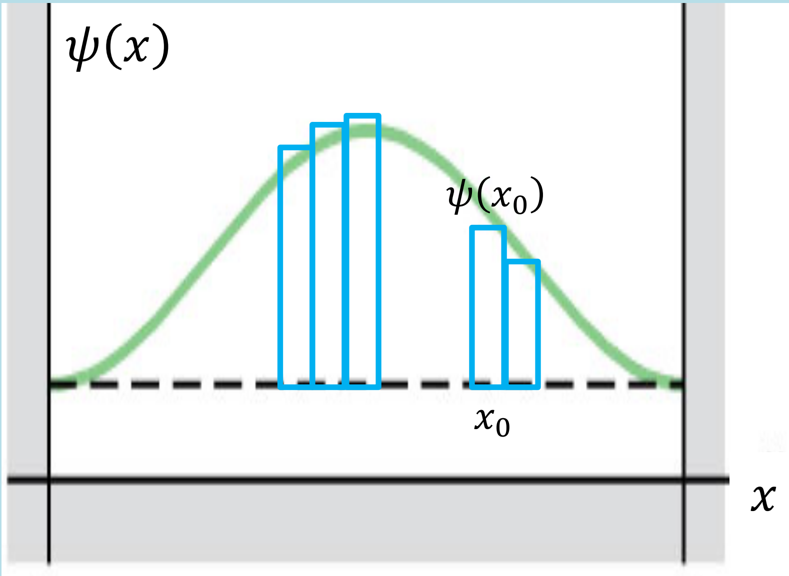
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi(x)^* \cdot \psi(x) \equiv \langle \phi, \psi \rangle$$

狀態函數$\psi(x)$本身其實就可以理解為是狀態向量展開的分量。



收集位置算子$\hat{x}$，所有本徵值x_0的本徵函數$\delta(x - x_0)$，就組成一組基底

任何函數可以以此基底展開，在此即如下，以$\psi(x_0)$分量一個個$\delta(x - x_0)$疊加！



$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0\, \psi(x_0)\, \delta(x - x_0)$$

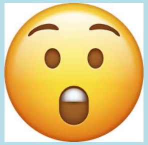
分量　　本徵函數

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

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

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：

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



如果狀態函數$\psi(x)$就是向量的分量，以上積分就是標準的內積！

記得位置x現在等同是基底的標記m。

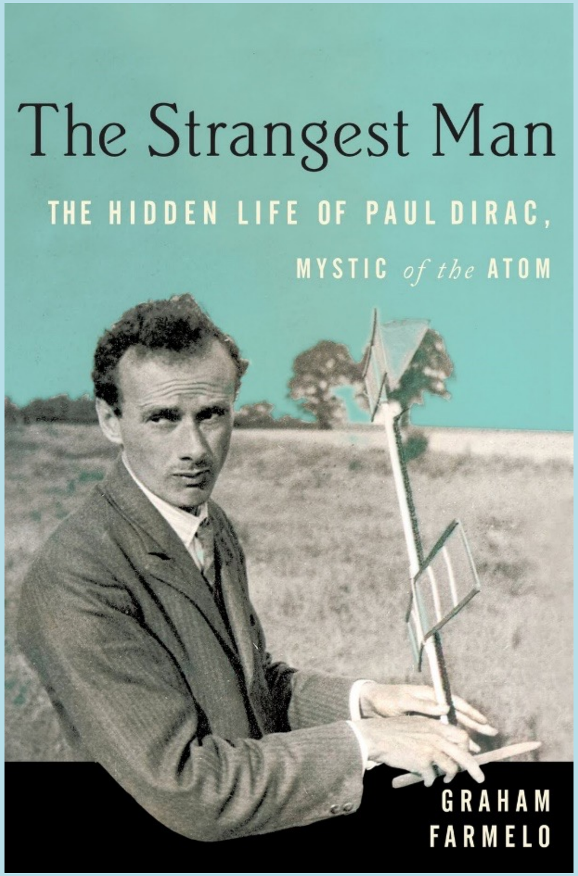
$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{m=1}^{l} a_m b_m$$

向量分析會以一個向量符號來代表一個向量，而不會直接寫出向量的分量。

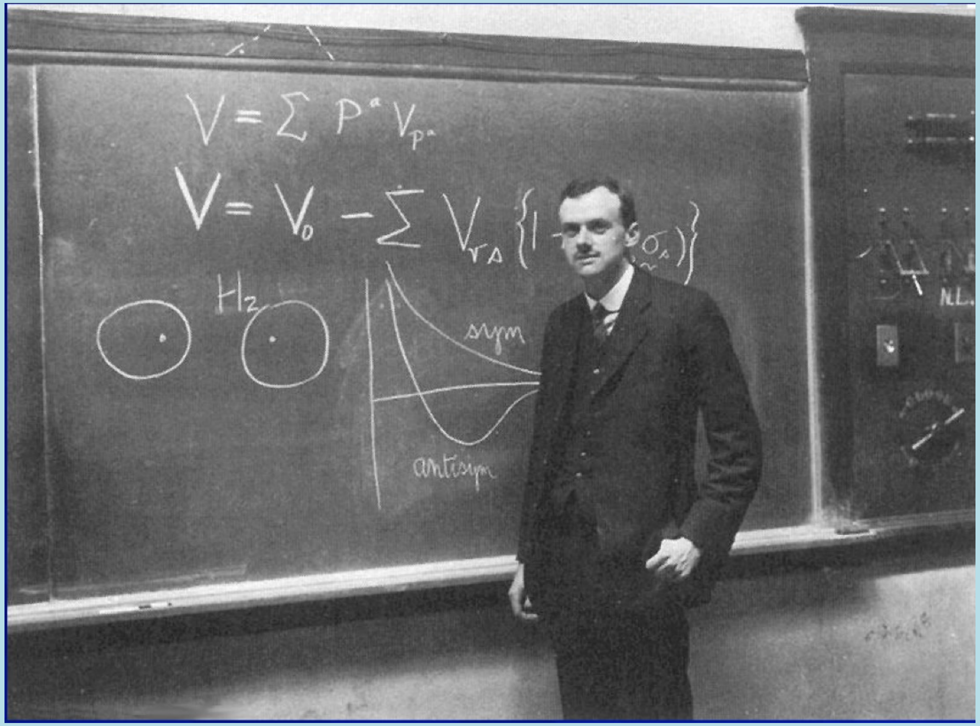
我們也應該以一個抽象的符號來代表一個狀態，而無需寫出狀態函數。

狄拉克更進一步發明一系列的符號來使此數學結構更加突顯！

Paul Dirac 1902-1984




Scanned at the American
Institute of Physics


H_2
sym
antisym

Dirac find it’s possible for 4 by 4 matrices $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$

$$p^\mu p_\mu - m^2c^2 = (\gamma^\kappa p_\kappa + mc)(\gamma^\lambda p_\lambda - mc) = 0$$

Pick the first order factor: $\gamma^\mu p_\mu - mc = 0$

Make the replacement and put in the wave function:

$$p^\mu \to i\partial_\mu$$

$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\psi = 0$ Dirac Equation

If γ’s are 4 by 4 matrices, *Ψ* must be a 4 component column:

$$i\left(\gamma^0 \frac{\partial \psi}{\partial t} + \gamma^i \frac{\partial \psi}{\partial x^i}\right) - m\psi = 0 \qquad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Note that it consists of 4 Equations.

這個方程式是場方程式，而不是波方程式。

它描述相對論性的電子，預測電子是有自旋的。

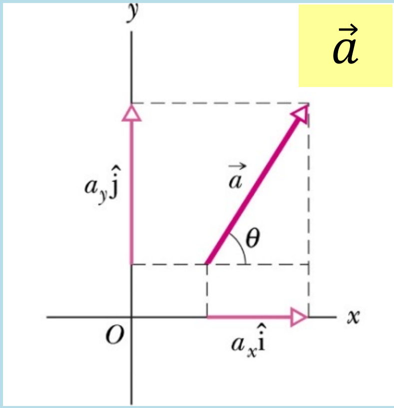
This result is too beautiful to be false; it is more important to have beauty in one's equations than to have them fit experiment.

Dirac Notation

向量分析會以一個向量符號來代表一個向量，而不會直接寫出向量的分量。

我們也應該以一個抽象的符號來代表一個狀態，而無需寫出狀態函數。

狄拉克用來代表狀態的符號，是以內積為設計的核心。



內積是兩個狀態函數相乘的積分，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi(x)^* \cdot \psi(x) \equiv \langle \phi, | \psi \rangle$$

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

狄拉克建議：狀態函數$\psi(x)$，用切開的內積符號的右半部來表示：

$\psi(x)$ $\longrightarrow$ $|\psi\rangle$ 稱為Ket。對應抽象的向量符號：$\vec{b}$

一般把ψ寫在ket符號內，來表示這是$\psi(x)$所對應的狀態！

接著你可能會以為積分式內的$\phi(x)^*$也用同樣的符號$|\phi\rangle$表示，內積寫成$|\psi\rangle \cdot |\phi\rangle$。

但別忘了積分之中，左邊的函數要取複數共軛：左右有別。所以這不對！

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

積分之中，左邊函數要取複數共軛：左右有別，左邊狀態要有不同的符號。

狄拉克建議：$\phi(x)^*$用切開的內積符號的左半部表示。

$\phi(x)^*$ ➡ $\langle \phi |$ 稱為Bra，線性代數術語稱為Co-vector或Dual。 $\vec{a}$

一樣把ϕ寫在Bra符號內，來表示這是代表$\phi(x)^*$！

雖然也是來自狀態函數，Bra $\langle \phi |$ 開口向右，正好與開口向左的Ket $|\psi\rangle$準備對接。

當Bra與Ket合體成為一Bracket，即這兩個狀態的內積，符號就是：$\langle \phi | \psi \rangle$。

$\langle \phi |$ $|\psi\rangle$ ➡ $\langle \phi | \psi \rangle$ 為一個複數。 $\vec{a} \cdot \vec{b}$

這就是Bra與Ket符號設計的核心概念，一左一右才能非常得到內積！

兩個右方ket $|\psi\rangle|\phi\rangle$的組合就不是內積的數，而是新的空間：稱張量積。

Bra及Ket這些符號看起來很抽象，但其實就是狀態函數，及其複數共軛。

$\psi(x)$ ➡ $|\psi\rangle$

$\phi(x)^*$ ➡ $\langle\phi|$ 所以bra就是狀態函數取複數共軛$\phi(x)^*$。

就如同一個向量$\vec{a}$，在計算上其實就是分量a_i的組合。

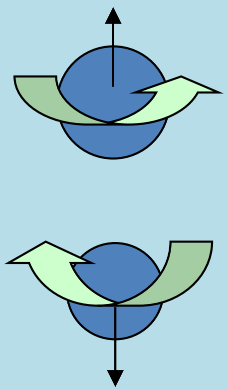
抽象的內積，其實是函數乘積的積分：

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

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 歸一化條件，物理狀態ψ只能是單位向量！向量長度需為1。

這樣的符號凸顯電子的狀態是一個向量，這是一個指向未來的符號系統！

不久會介紹古典沒有的電子自旋，它的狀態就不是位置波函數，而真是向量。



$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

兩個分量的向量，寫成Column。

這個抽象的內積，其實是函數乘積的積分：

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

因此內積對右邊ket是線性。

$$\langle \phi | (c_1 | \psi_1 \rangle + \ c_2 | \psi_2 \rangle) = c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle$$

bra基本上就是狀態函數取複數共軛$\phi(x)^*$。內積對左邊bra是共軛線性。

$$(\langle c_1 \phi_1 | + \langle c_2 \phi_2 |) | \psi \rangle = c_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle$$

所以兩個Ket的線性組合$c_1 | \phi_1 \rangle + c_2 | \phi_2 \rangle$，所對應的Bra是 $c_1^* \langle \phi_1 | + c_2^* \langle \phi_2 |$，

一般內積與前後次序無關。

但這裡的內積前後次序對調後，會是對調前內積的複數共軛。

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^* \cdot \phi = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi^* \cdot \psi \right)^* = \langle \phi | \psi \rangle^*$$

物理量 ➡ 算子 $\hat{A}$

矩陣

算子$\hat{A}$是向量空間上的線性變換，將向量映射到向量。

算子$\hat{A}$作用於一狀態$\psi(x)$，就得到向量空間上的另一狀態$\hat{A}\psi(x)$，對應：$\hat{T}\vec{a}$

用新的符號寫：

$\hat{A}\psi(x)$ ➡ $\hat{A}|\psi\rangle \equiv |\hat{A}\psi\rangle$ 例如：$\hat{p}\psi \equiv -i\hbar\dfrac{d\psi}{dx}(x)$

如此測量期望值可以寫成：

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

➡ $|\hat{A}\psi\rangle$ 與 $\langle\psi|$ 的內積 $\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle$

$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle$ 新的內積符號使期望值表示式非常簡潔！

此定義可以推廣到$\hat{A}$介於不同態之間形成的量，寫成：$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$ 以後很有用！

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

稱為$\hat{A}$的矩陣元matrix element。

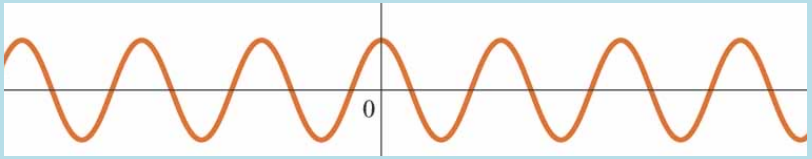
測量值確定的本徵態

$\hat{A}\psi_a(x) = a\psi_a(x)$ ➡ $\hat{A}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$

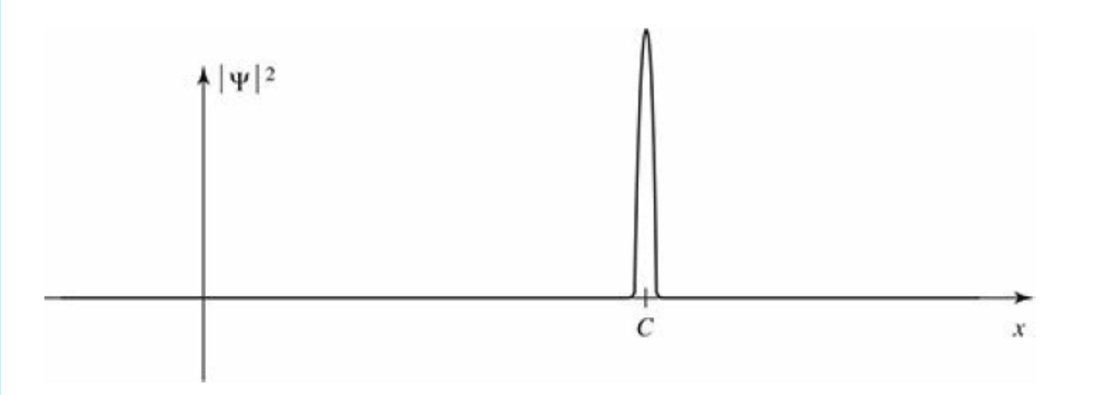
通常會把本徵值寫在ket符號內，來標定是本徵態。 $|\psi_a\rangle \to |a\rangle$ $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$

例如：動量的本徵態

$u_{p_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$ ➡ $|p_0\rangle$



$\hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle$



位置的本徵態

$\delta(x - x_0)$ ➡ $|x_0\rangle$

$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$

能量的本徵態，定態：$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

任一狀態$|\psi\rangle$可以以所有$|a\rangle$組成的基底展開，分量c_a等於：$c_a = \langle\psi_a, \psi\rangle \equiv \langle a|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_a c_a|a\rangle = \sum_a \langle a|\psi\rangle|a\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\psi\rangle$$

Adjoint算子

$\hat{A}$ 對應的矩陣元：$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle \equiv \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi^*(x) \cdot \hat{A}\psi(x)$$

通常算子作用在右邊的Ket，有時候算子也可以看成作用在左邊Bra上，例如：

$$\langle\phi|\hat{x}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi(x)^*[x\psi(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot [x\phi]^*\psi \equiv \langle\hat{x}\phi|\psi\rangle$$

$\hat{p}$算子也是：

$$\langle\phi|\hat{p}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \phi(x)^* \cdot i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx} = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot i\hbar\left[\frac{d\phi(x)}{dx}\right]^* \psi(x) + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \frac{d[\phi(x)^*\psi(x)]}{dx}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \left[i\hbar\frac{d\phi(x)}{dx}\right]^* \psi(x) + i\hbar\,\phi(x)^*\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \left[i\hbar\frac{d\phi(x)}{dx}\right]^* \psi(x) \equiv \langle\hat{p}\phi|\psi\rangle$$

具有這樣性質的算子稱為Hermitian算子：

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

$$\langle \phi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}\phi | \psi \rangle$$

Hermitian算子的期望值永遠是實數!

$$\langle \hat{A} \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}\psi \rangle^* = \langle \hat{A}\psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle$$

大膽推測：可測量的物理量都由 Hermitian算子代表！

本徵值就是本徵態的期望值，Hermitian算子的期望值是實數！

因此Hermitian算子的本徵值必是實數。

一般來說，算子不一定是Hermitian。

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle \equiv \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$$

這個內積，也可以表示為$|\psi\rangle$，與ϕ經過某個線性變換後的態$\hat{A}^{\dagger}\phi$的內積：

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = (\langle\hat{A}^{\dagger}\phi|)\cdot|\psi\rangle$$

$\langle\hat{A}^{\dagger}\phi|$是Ket$|\hat{A}^{\dagger}\phi\rangle$對應的Bra。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\phi(x)^{*}[\hat{A}\psi(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot[\hat{A}^{\dagger}\phi(x)]^{*}\psi(x)$$

以上就是$\hat{A}^{\dagger}$的定義，稱為$\hat{A}$的Adjoint算子。

$\hat{A}^{\dagger}$的Adjoint就是$\hat{A}$。 $(\hat{A}^{\dagger})^{\dagger}= \hat{A}$

$$(c\hat{A})^{\dagger}= c^{*}\hat{A}^{\dagger}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot\phi(x)^{*}[c\hat{A}\psi(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\cdot[c^{*}\hat{A}^{\dagger}\phi(x)]^{*}\psi(x)$$

因此Hermitian算子的定義，就是它與它的Adjoint算子相等！

$$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$$

$\hat{p}^{\dagger} = \hat{p}$ $\hat{x}^{\dagger} = \hat{x}$ $\hat{H}^{\dagger} = \hat{H}$

量子力學原則以狄拉克符號表示的完整版

某一個時刻的狀態 $\longrightarrow$ 狀態單位向量 $|\psi\rangle$

隨時間變化的狀態 $\longrightarrow$ 隨時間演化的向量 $|\psi(t)\rangle$

物理量測量 $\longrightarrow$ Hermitian算子 $\hat{A}$

有古典對應的物理量，就直接將位置算子及動量算子代入同樣的數學形式：

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

就得到量子力學對應的算子。

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

把對應算子放入此式就可得到測量期望值。

$$\hat{A}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$$

對一物理量$\hat{A}$測量，結果完全確定的狀態，
就是該物理量對應算子$\hat{A}$的本徵函數$|\psi_a\rangle$，本徵值a就是測量結果。

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t}$$

狀態向量隨時間的演化由漢米爾頓量算子來負責！

$\psi(x)$ $|\psi\rangle$

$\hat{\mathcal{A}}$

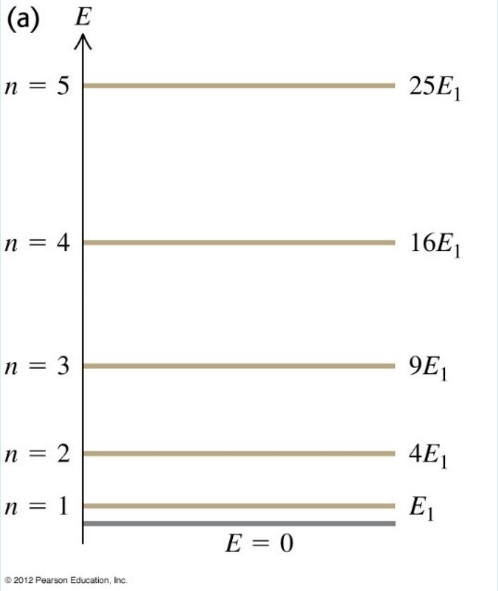
不同的狀態下，機率的分佈不同！

但可能的結果卻一樣！

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

算子是很有個性的！

由它的本徵值來決定測量的結果有哪些可能！

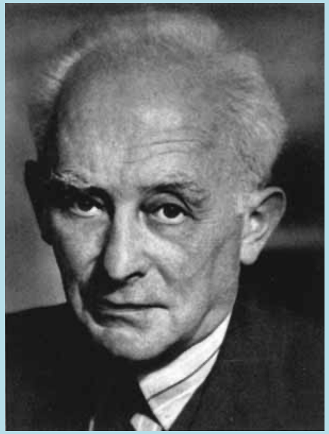


算子有它的堅持！

我們會發現算子彼此的代數關係，有時竟會直接決定它們的本徵值！

算子與數最大不同是沒有交換性。。

波恩指出位置與動量就不能對易 Commute！ $\hat{x}\cdot\hat{p}\neq\hat{p}\cdot\hat{x}$



計算$\hat{x}\cdot\hat{p}-\hat{p}\cdot\hat{x}$，把此算子作用在某函數上會比較好想像：

$$(\hat{x}\cdot\hat{p}-\hat{p}\cdot\hat{x})\psi(x)=-i\hbar x\frac{d\psi}{dx}-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)[x\cdot\psi(x)]=i\hbar\psi$$

這個結果對任意狀態$\psi(x)$都對。因此是一個算子的等式！

$$\hat{x}\cdot\hat{p}-\hat{p}\cdot\hat{x}=i\hbar$$

定義一個新符號：Commutator 對易子 $[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A}$

$\hat{x}\cdot\hat{p}-\hat{p}\cdot\hat{x}\equiv[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ 位置與動量的對易算子是常數算子。這很特別。

稱為量子化條件，Quantization Condition 標誌古典物理量與量子物理量的不同！

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$$

$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 量子化條件，Quantization Condition

你也可以由此量子化條件出發，推導出動量算子，等於位置的微分：

兩者邏輯上等價。這也可以看成量子力學的一個基本假設！

由這個量子化條件可以推導出測不準原理： $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$

是否可以用量子化條件的方式，直接探討算子的代數關係？

$\hat{p} = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$ $\Longrightarrow$ $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

有了量子化條件，所有粒子運動的量子力學，都能推導出來。

我們將以量子彈簧的能階作例子來說明！

關鍵就是找到由$\hat{x}, \hat{p}$組成的物理量算子彼此的對易子。

幾個有用的公式：

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A, B] = AB - BA = -(BA - AB) = -[B, A]$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$ 分配律

$$[A + B, C] = (A + B)C - C(A + B) = AC - CA + BC - CB = [A, C] + [B, C]$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

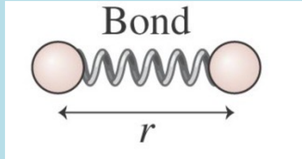
$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B$$

簡諧振盪器是在彈力位能內的粒子、在古典情況下是束縛態，

我們預期對應的電子波的定態，能量是量子化的。定態方程式：

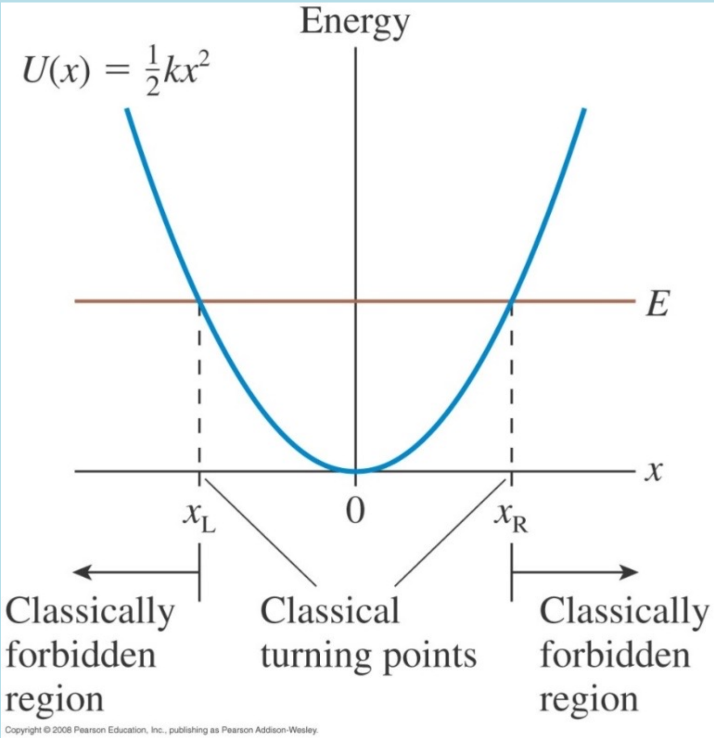
$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}kx^2 - E\right)\psi_E$$

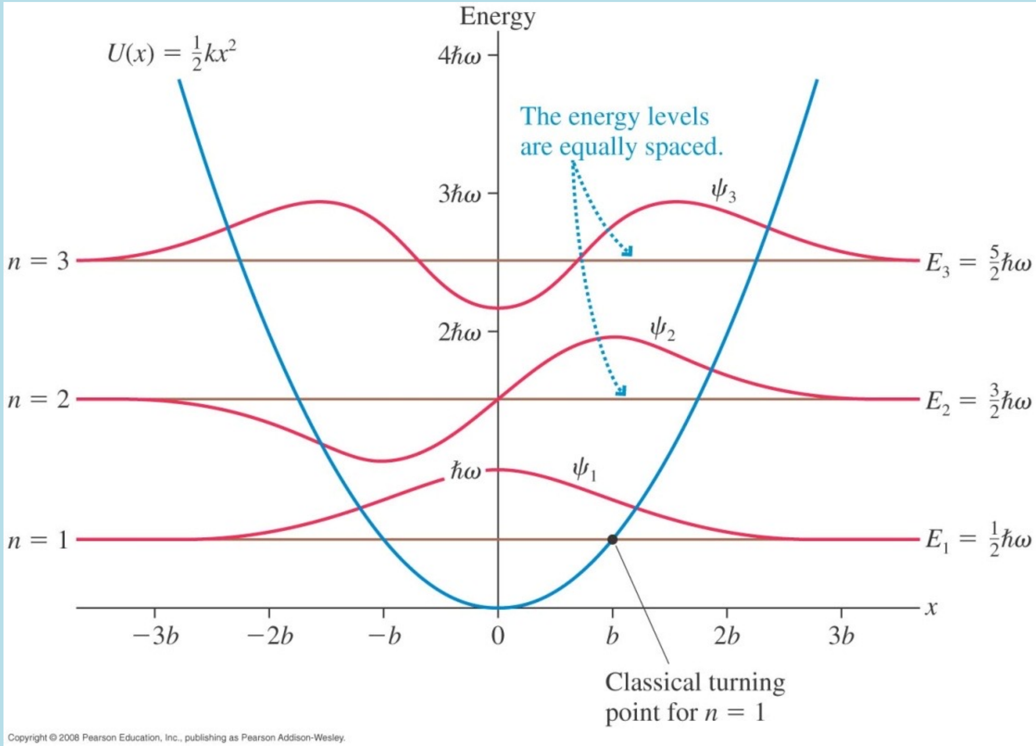


這是一個二次常微分方程式，可以求解。只有某些E會有解！

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

Energy is quantized

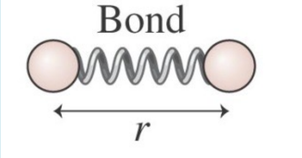




現在我們採新的方式，用算子的代數關係，計算Quantum SHO的能量本徵值！

從能量算子出發，以下在符號中不加帽子，但物理量都是算子。

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2$$



能量看起像兩個獨立的平方項！

但兩個平方項的和，可以分解Factor成一個複數與其共軛的乘積：

$$u^2+v^2=(v+iu)(v-iu)$$

能量好像也可以分解，複數$v+iu$是位置與動量的線性組合：

$$v+iu\sim x+ip$$

然而x,p並不像一般的數可以對易。但似乎可以往這個方向試一試。

這樣分解為什麼有用，也要等一下才會清楚。

以前頁的分解動作為啟發，

引入位置與動量的線性組合：定義新的算子a，及他的共軛$a^\dagger$：

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

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x^\dagger - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

常數的選擇是為了使a及他的共軛$a^\dagger$ 無單位。之前解微分方程式時，我們就作過。

將 Hamiltonian 以a算子及他的共軛$a^\dagger$來表示：

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

將定義倒過來，然後代入即可：

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger)$$

$$= -\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)\frac{(a - a^\dagger)^2}{2m} + \frac{k}{2}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(a + a^\dagger)^2$$

$$(aa + a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a + aa^\dagger)$$

算子a及$a^\dagger$可能不對易don’t commute.

$$= \frac{1}{4}\hbar\omega\left[-(a - a^\dagger)^2 + (a + a^\dagger)^2\right] = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger) = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + a^\dagger a + [a,a^\dagger])$$

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\hbar\omega[a,a^\dagger]$$

能量幾乎分解成了一個複數與其共軛的乘積。

但我們需要代入算子a及共軛$a^\dagger$的對易關係 Communication Relation。

之前的推導：

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

方程式簡化為： ➡ $$\frac{d^2u}{dy^2} = y^2u - \varepsilon u$$

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

給此單位制中的位置、新的名字y。

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

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

量子化條件會給出算子a及共軛$a^\dagger$的對易關係 Communication Relation：

$$\left[a, a^\dagger\right] = \frac{1}{2\hbar}\left[\sqrt{m\omega}x + i\sqrt{\frac{1}{m\omega}}p, \sqrt{m\omega}x - i\sqrt{\frac{1}{m\omega}}p\right] =$$

Commuter如乘法一樣，滿足分配率。 $[A+B, C] = [A, C] + [B, C]$

$$[A+B, C] = (A+B)C - C(A+B) = AC - CA + BC - CB = [A, C] + [B, C]$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\left\{m\omega[x, x] + i[p, x] - i[x, p] + \frac{1}{m\omega}[p, p]\right\} = \frac{1}{2\hbar}2\hbar = 1$$

$$\left[a, a^\dagger\right] = 1$$

因此我們的分解幾乎成立，只差一個常數。

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \hbar\omega \cdot a^\dagger a + \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot [a, a^\dagger] = \hbar\omega \cdot a^\dagger a + \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

由此a及$a^\dagger$的對易關係可以得出算子H與a及$a^\dagger$的對易關係。

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega[a^\dagger a, a^\dagger]$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B$$

運用上面的式子。

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega[a^\dagger a, a^\dagger] = \hbar\omega\{a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a\} = \hbar\omega \cdot a^\dagger$$

$$\Downarrow$$

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega \cdot a^\dagger \qquad [H, a\,] = -\hbar\omega \cdot a$$

這個結果非常有用。

$$[H, a^\dagger] = Ha^\dagger - a^\dagger H = \hbar\omega \cdot a^\dagger$$

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

現在將共軛算子$a^\dagger$作用在H的一個本徵態上：$a^\dagger|E\rangle$。

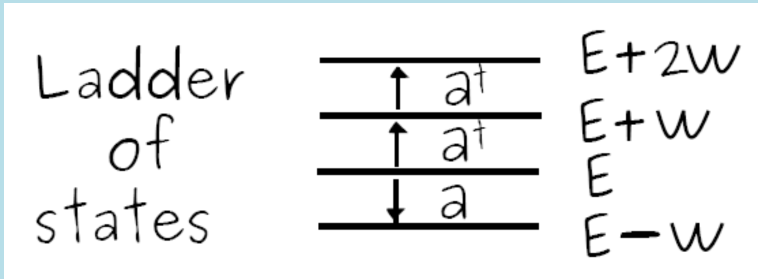
再將算子H作用在這個狀態上$a^\dagger|E\rangle$，測試它是不是本徵態：

$$Ha^\dagger|E\rangle = a^\dagger H|E\rangle + [H, a^\dagger]|E\rangle + \; = Ea^\dagger|E\rangle + \hbar\omega \cdot a^\dagger|E\rangle = (E + \hbar\omega) \cdot a^\dagger|E\rangle$$

$$H \cdot a^\dagger|E\rangle = (E + \hbar\omega) \cdot a^\dagger|E\rangle$$

因此$a^\dagger|E\rangle$也是算子H的一個本徵態，其本徵值是$E + \hbar\omega$。

$a^\dagger$算子可以提高本徵態的能量 by $\hbar\omega$.



如果是算子a作用在算子H的一個本徵態$|E\rangle$

$$[H, a\,] = -\hbar\omega \cdot a$$

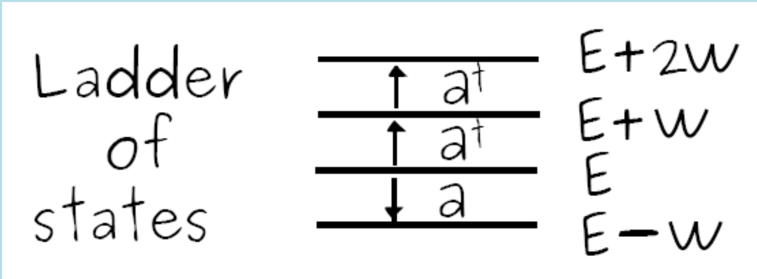
$$H\ a|E\rangle = aH|E\rangle + [H, a\,]|E\rangle + \ = Ea|E\rangle - \hbar\omega \cdot a|E\rangle = (E - \hbar\omega) \cdot a^{\dagger}|E\rangle$$

$$H\ a|E\rangle = (E - \hbar\omega) \cdot a|E\rangle$$

因此$a|E\rangle$也是算子H的一個本徵態，其本徵值是$E - \hbar\omega$。

a 算子可以降低本徵態的能量 by $\hbar\omega$.

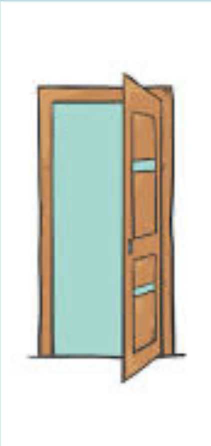
$a^{\dagger}$ is called Raising Operator while a Lowering Operator.



$$Ha^\dagger|E\rangle = a^\dagger H|E\rangle + \left[H, a^\dagger\right]|E\rangle$$

$a^\dagger$

$a^\dagger$



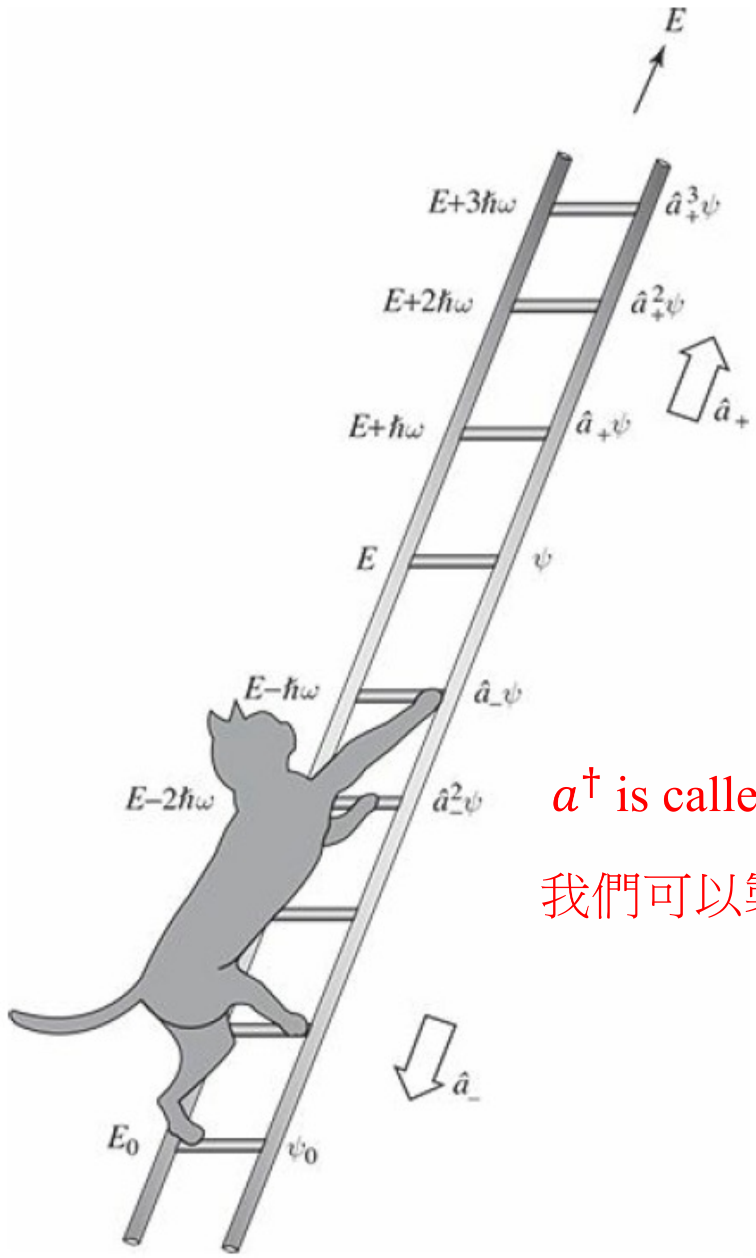


Figure 2.5: The "ladder" of states for the harmonic oscillator.

$a^{\dagger}$ is called Raising Operator while a Lowering Operator.

我們可以製造出一個各個能量差為$\hbar\omega$的一系列狀態。

量子彈簧能量是量子化的！

Summary

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

$$a^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

$$[a, a^{\dagger}] = 1$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \hbar\omega a^{\dagger}a + \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$[H, a^{\dagger}] = \hbar\omega \cdot a^{\dagger}$$

$$[H, a\,] = -\hbar\omega \cdot a$$

$$H \cdot a^{\dagger}|E\rangle = (E + \hbar\omega) \cdot a^{\dagger}|E\rangle$$

因此$a^{\dagger}|E\rangle$也是算子H的一個本徵態，其本徵值是$E + \hbar\omega$。

$a^{\dagger}$算子可以提高本徵態的能量 by $\hbar\omega$.

$$H\ a|E\rangle = (E - \hbar\omega) \cdot a|E\rangle$$

因此$a|E\rangle$也是算子H的一個本徵態，其本徵值是$E - \hbar\omega$。

a 算子可以降低本徵態的能量 by $\hbar\omega$.

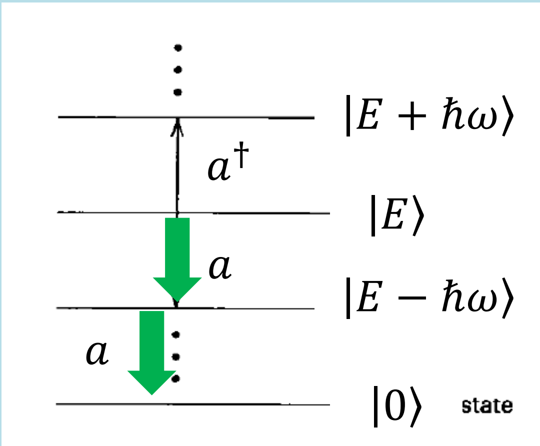
從任一能量本徵態$|E\rangle$出發，連續使用a降低能量：$a|E\rangle$，

最後總要有停止之處，能量不能再降，將此態記$|0\rangle$：

此態$|0\rangle$顯然必需滿足條件：$\boxed{\hat{a}|0\rangle = 0}$

此態$|0\rangle$的能量：$\boxed{H|0\rangle = \hbar\omega \cancel{a^\dagger a}|0\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle}$

它$|0\rangle$是能量本徵態，本徵值為$\frac{\hbar\omega}{2}$，能量最低，就稱為基態 Ground State！

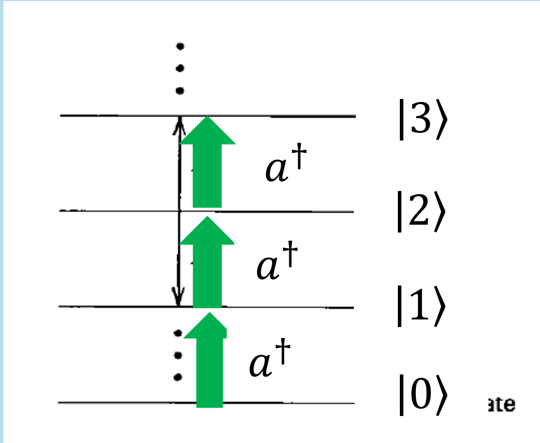


得到基態後，倒過來將$a^\dagger$連續作用在基態$|0\rangle$上，就得到一系列本徵態：

$a^\dagger$算子可以提高本徵態的能量 by $\hbar\omega$.

$a^\dagger|0\rangle \propto |1\rangle$ $\quad E_1 = \hbar\omega\left(1+\frac{1}{2}\right)$

$a^\dagger|1\rangle \propto |2\rangle$ $\quad E_2 = \hbar\omega\left(2+\frac{1}{2}\right)$



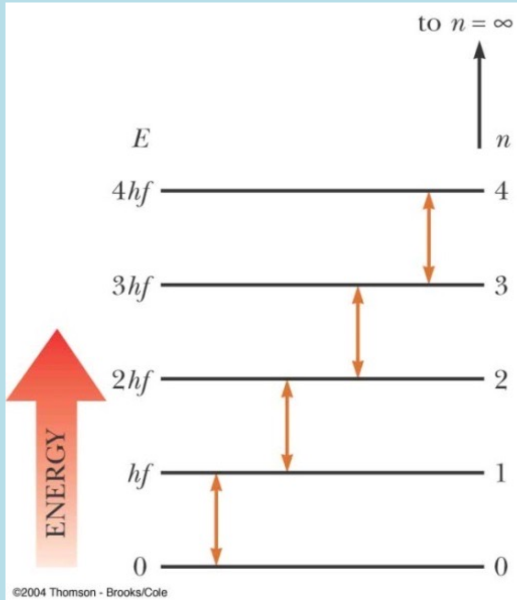
能態依$a^\dagger$作用次數n編號，n也是能量子數目：

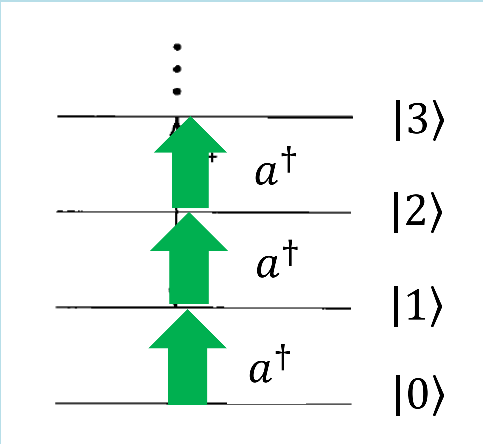
$a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ $\quad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ 此即普朗克能階

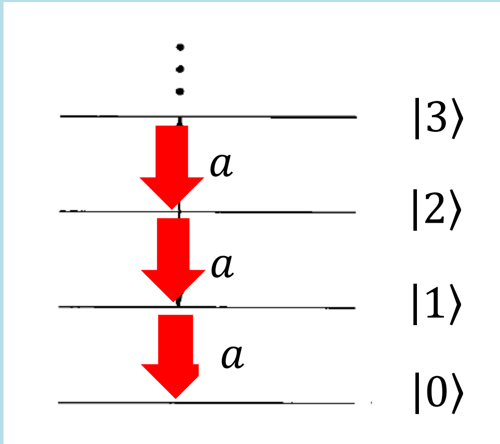
$$H|n\rangle = \left(\hbar\omega a^\dagger a + \frac{\hbar\omega}{2}\right)|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\cdot|n\rangle$$

很明顯的，$a^\dagger a$就是能量子數目： $a^\dagger a\cdot|n\rangle = n|n\rangle$

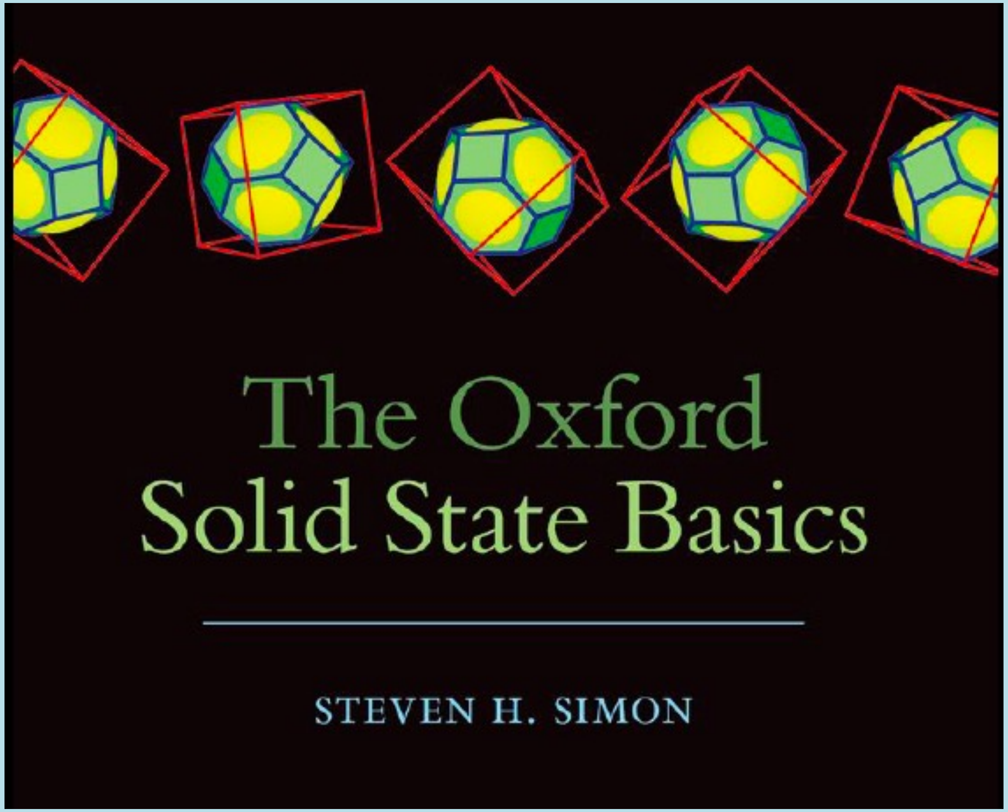
我們幾乎已得到本徵值與本徵態了，但還沒有完全。







量子簡諧振盪器的定態能階



Vibrations of a One-Dimensional Monatomic Chain

9

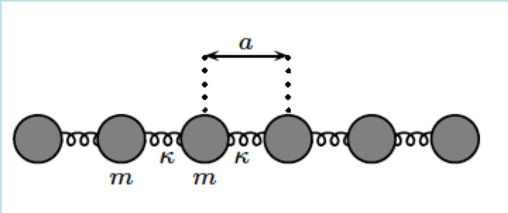
In Chapter 2 we considered the Boltzmann, Einstein, and Debye models of vibrations in solids. In this chapter we will consider a more detailed model of vibration in a solid, first classically, and then quantum-

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：

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

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



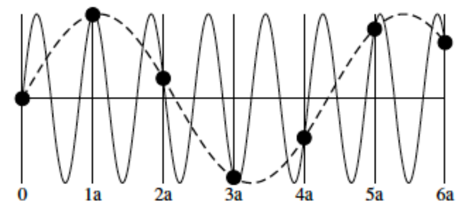
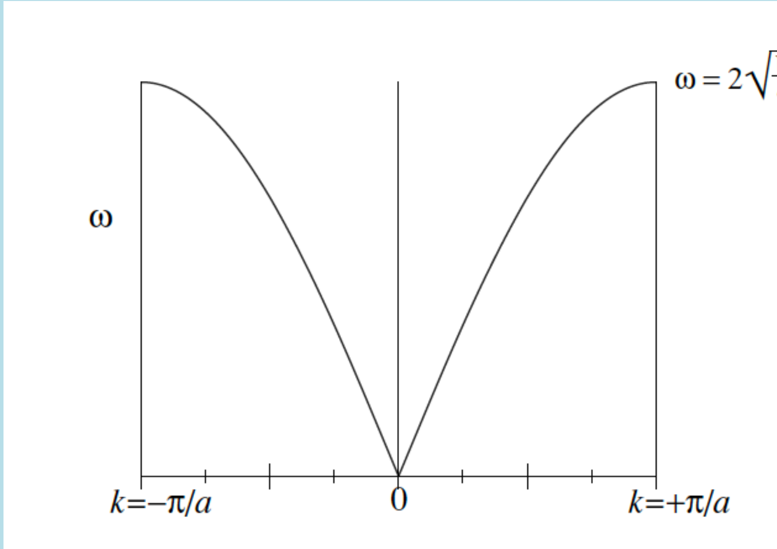
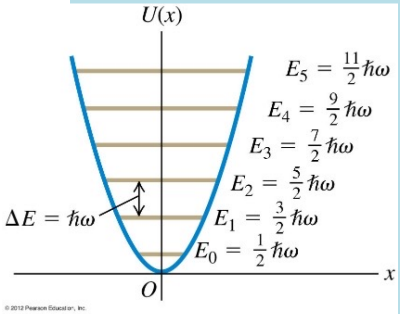


Fig. 9.3 Aliasing of waves. The dashed curve has wavevector k whereas the solid curve has wavevector $k + 2\pi/a$. These two waves have the same value (solid dots) at the location of the lattice points $x_n = na$, but disagree between lattice points. If the physical wave is only defined at these lattice points the two waves are fully equivalent.

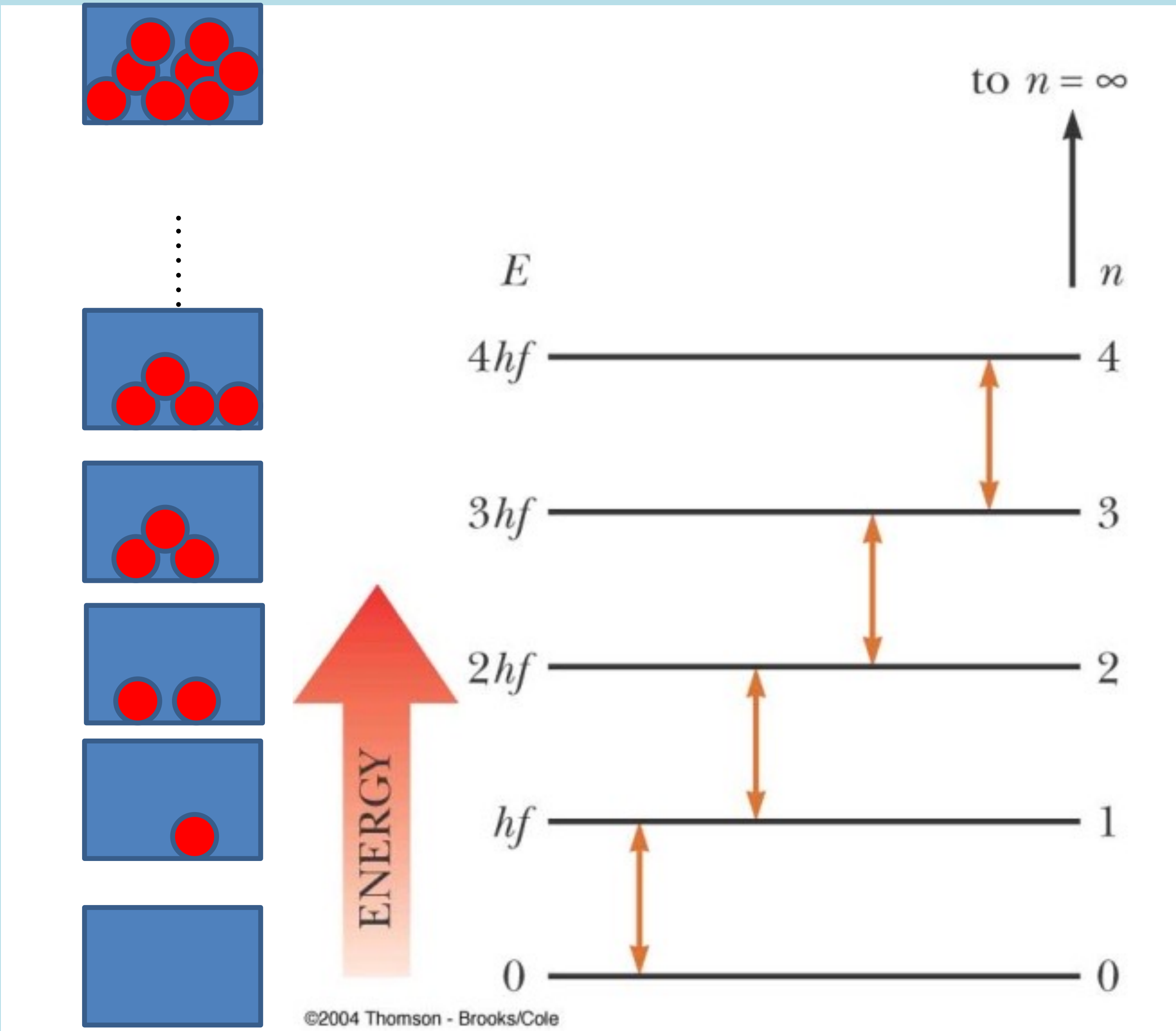




晶體中原子的振動，可以找到一系列如彈簧的模式。

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。

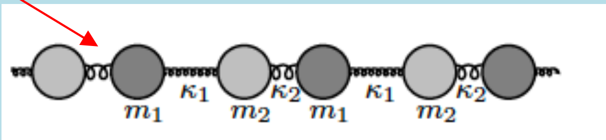


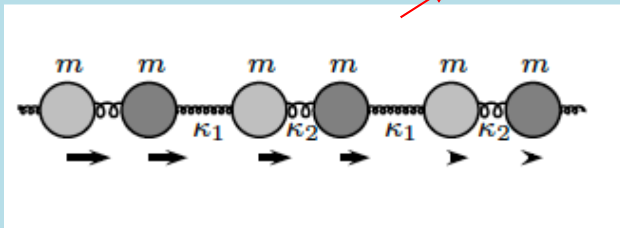
每一角波數k模式的能階像極了在盒子中一個個裝入能量相同的粒子。

量子 ⇨ 粒子 粒子數 $n = \dfrac{E}{\hbar\omega(k)}$

這就稱為聲子 phonon：量子彈簧的激發態！

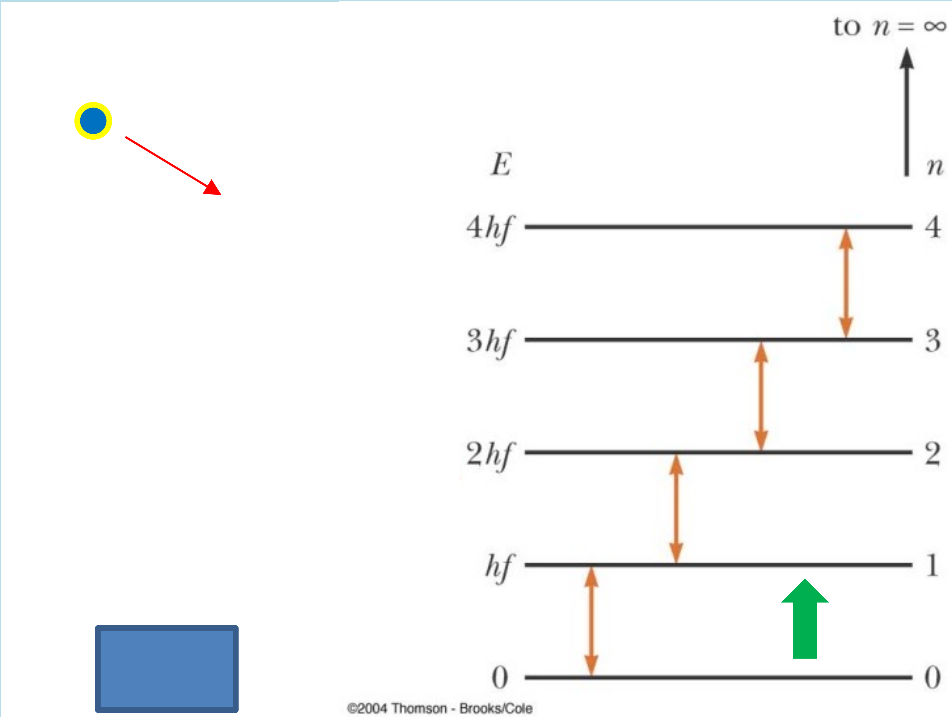
電子碰撞晶體中的原子鏈

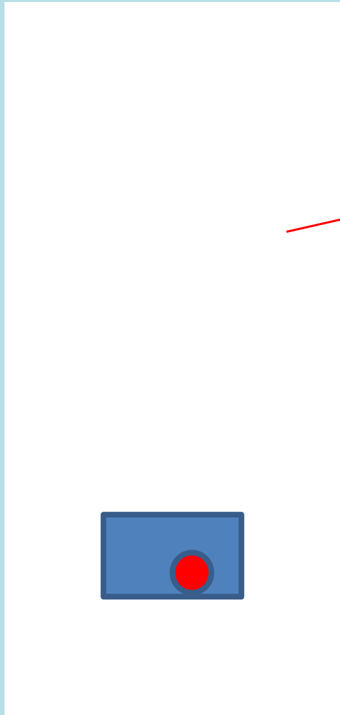




等同

電子碰撞激發某個模式k由$n = 1$定態躍遷到$n = 2$定態。



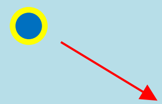


等同

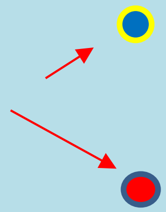
電子移動中放出一個角波數為k的聲子

聲子好像一個基本粒子！

電子移動中放出一個角波數為k的聲子：



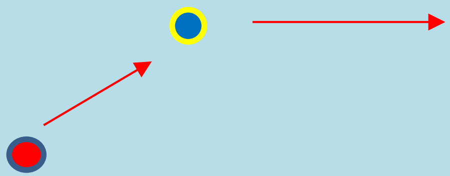
$$\sim a^{\dagger}$$



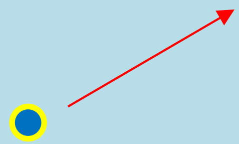
描述產生聲子過程的物理量，就幾乎是$a^{\dagger}$算子，

這時就會稱$a^{\dagger}$算子為creation operator.

電子移動中也可以吸收一個已經存在的角波數為k的聲子：



$$\sim a$$



描述吸收消滅聲子過程的物理量，就幾乎a算子，

這時就會稱a算子為annhilation operator.

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ 但這個態$a^\dagger|n\rangle$，不滿足歸一化條件，向量長度不為1。

取這個態 ket $|a^\dagger n\rangle$與它對應的bra $\langle a^\dagger n|$的內積來計算算向量長度：

$$\langle a^\dagger n|a^\dagger n\rangle = \langle n|a\cdot|a^\dagger n\rangle = \langle n|a\cdot a^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle + \langle n|n\rangle = n+1$$

定義：$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \left(\langle\hat{A}^\dagger\phi|\right)\cdot|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle$

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1$$

若要得到歸一化的$|n+1\rangle$，必須將除以向量長$\sqrt{n+1}$。

$$a^\dagger a\cdot|n\rangle = n|n\rangle$$

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n\rangle$$

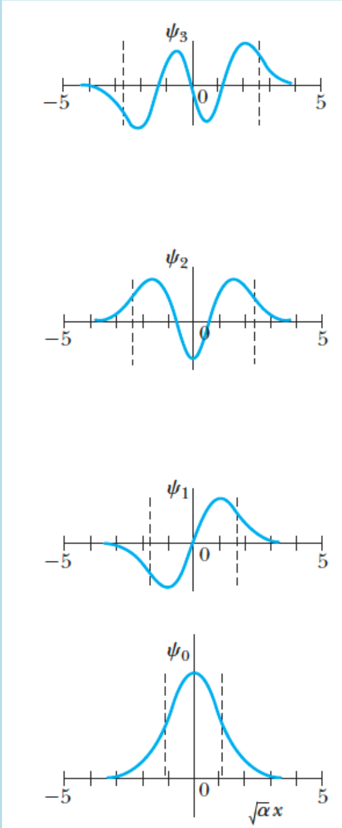
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\cdot|n+1\rangle$$

利用類似的方法：

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a|n\rangle$$

請自己試著推導！

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle$$



$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^{\dagger} |n\rangle$$

第一激發態可以由基態以$a^{\dagger}$製造出來！

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} a^{\dagger} |0\rangle$$

第二激發態又由第一激發態以$a^{\dagger}$製造出來！

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{\dagger} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} a^{\dagger} a^{\dagger} |0\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^{\dagger}\right)^{n} |0\rangle$$

SHM的整個量子空間就被定義為以這些能量本徵態為基底所展開的空間！

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

別忘了！抽象的ket符號$|n\rangle$就是代表上學期解出的定態的狀態函數$u_n(x)$！

$$|n\rangle \sim u_n(x)$$

Exercise :計算在能量本徵態$|n\rangle$，位置x及動量p的期望值。

$$\langle n|x|n\rangle$$

提示：$a|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\cdot|n+1\rangle$$

$$\langle n|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\left(a+a^\dagger\right)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle\right) = 0$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a+a^\dagger\right)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(a-a^\dagger\right)$$

Exercise :計算 $\langle m|x|n\rangle$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^\dagger\right)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(a - a^\dagger\right)$$

提示：$a|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle$ $\quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\cdot|n+1\rangle$

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\left(a + a^\dagger\right)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\langle m|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle\right)$$

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n}, \qquad m = n-1$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n+1}, \qquad m = n+1$$

其餘皆為零！

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

所以位置是一個矩陣。

Exercise :計算 $\langle m|p|n\rangle$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^\dagger\right)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(a - a^\dagger\right)$$

提示：$a|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle$ $\quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\cdot|n+1\rangle$

$$\langle m|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle n|\left(a - a^\dagger\right)|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n}\langle m|n-1\rangle - \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle\right)$$

$$\langle m|x|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sqrt{n}, \qquad m = n-1$$

$$= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sqrt{n+1}, \qquad m = n+1$$

其餘皆為零！

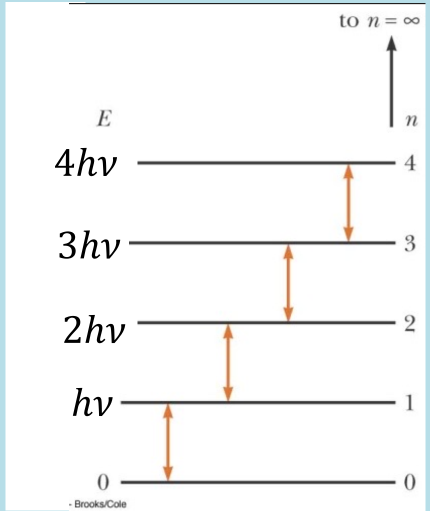
$$p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -i & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & i\sqrt{4} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -i\sqrt{4} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

所以動量也是一個矩陣。

海森堡大膽假設：

$$x = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

位置是一個表格！



$$p = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & \cdots \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & \cdots \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

動量也是一個表格！

以能階的量子數為排列的足標，所有電子性質的物理量都是表格！

Exercise :計算 $\langle n|x^2|n\rangle$

提示：$a|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle$

$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\cdot|n+1\rangle$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^\dagger\right)$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\left(a+a^\dagger\right)\left(a+a^\dagger\right)|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\left(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger\right)|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\left(aa^\dagger + a^\dagger a\right)|n\rangle$$

$$\langle n|aa|n\rangle \sim \langle n|n-2\rangle = 0$$

利用：

$$\langle n|a\cdot a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|a|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\langle n|n\rangle$$

$$\langle n|a^\dagger\cdot a|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|a|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1+1}\langle n|n\rangle$$

可以得到：

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\langle n|n\rangle + \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{n}\sqrt{n}\langle n|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

Exercise :計算在能量本徵態$|n\rangle$，位能$\frac{1}{2}kx^2$及動能$\frac{1}{2m}p^2$的期望值。

$$\left\langle n\middle|\frac{1}{2}kx^2\middle|n\right\rangle$$

$$\left\langle n\middle|\frac{1}{2}kx^2\middle|n\right\rangle=\frac{k}{2}\langle n|x^2|n\rangle$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)$$

注意最低能態的基態，位能與動能的期望值都不為零。

古典的基態是靜止於平衡點。能量為零。

$$\left\langle 0\middle|\frac{1}{2}kx^2\middle|0\right\rangle=\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\left\langle n\middle|\left(\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2m}p^2\right)\middle|n\right\rangle=E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\left\langle n\middle|\frac{p^2}{2m}\middle|n\right\rangle=\frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)$$

連續使用a降低能量，必須有停止之處$|0\rangle$，滿足以下條件： $a|0\rangle = 0$

上述的推導，其實假設了符合此條件的態$|0\rangle$只能有一個。真的嗎？

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

求解基態$|0\rangle$的波函數$u_0(x)$：別忘了！抽象的ket符號就是代表一個狀態函數的！

$$a|0\rangle = 0$$

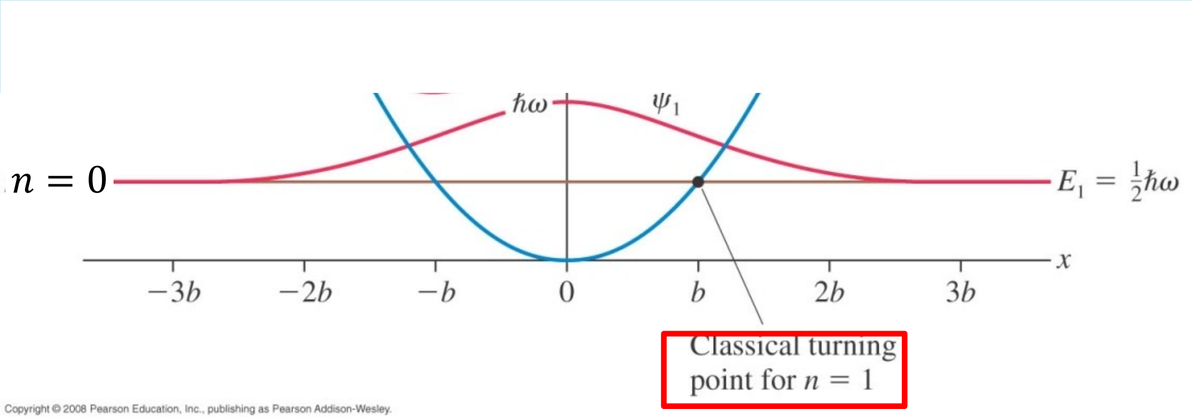
$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\cdot x|0\rangle + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\cdot p|0\rangle = 0$$

$$m\omega\cdot xu_0(x) + \hbar\frac{d}{dx}u_0(x) = 0$$

基態的波函數$u_0(x)$滿足：

$$\frac{d}{dx}u_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x \cdot u_0(x)$$

$$u_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$ 基態波函數就是高斯分佈，

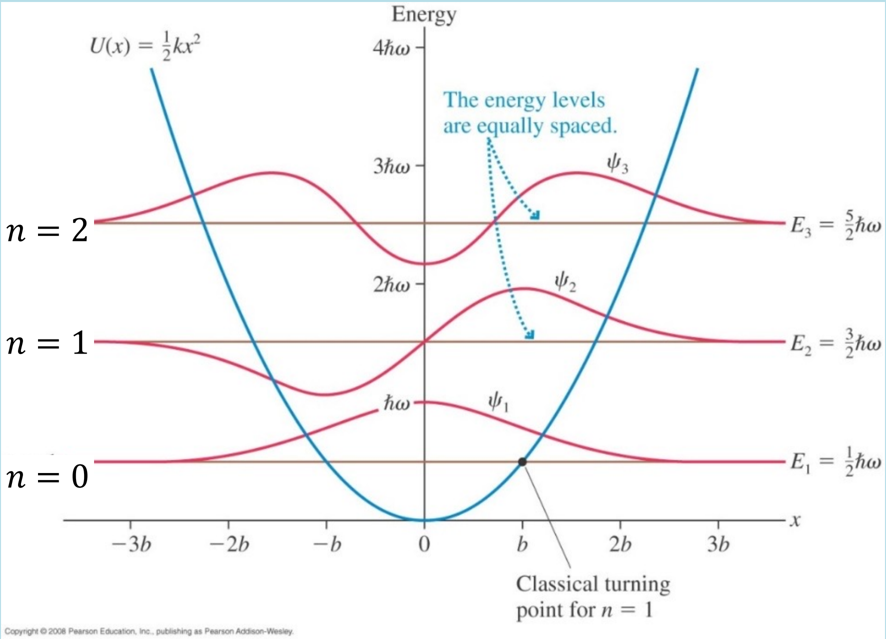


注意波函數超過了古典的Turning Point。

我們還可以由此寫下其他本徵態的狀態函數 $\psi_n(x)$：

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}} a^\dagger |0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x - \hbar \sqrt{\frac{1}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x)$$



$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^\dagger\right)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \right)^n \left(\sqrt{m\omega} x - \hbar \sqrt{\frac{1}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \psi_0(x)$$

這是量子簡諧振盪器，另一解定態函數的代數方法（有別於解微分方程式）！

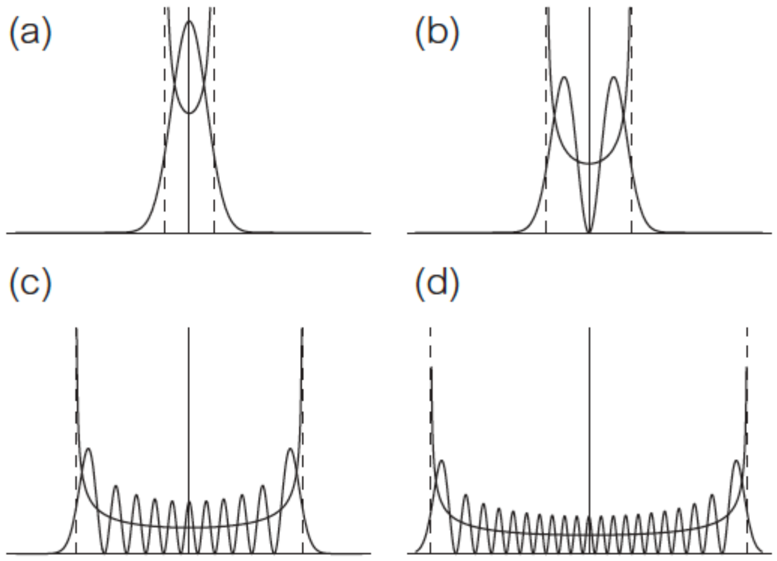
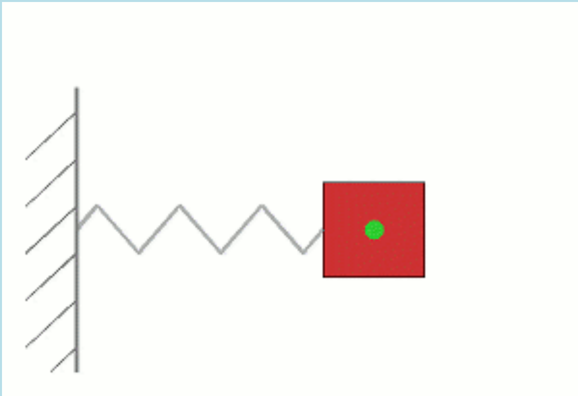


Figure 9.7. Classical (smooth, diverging curves) versus quantum probability distributions (oscillatory curves) for (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 10$, and (d) $n = 20$. The vertical dashed lines are turning points for the classical motion.

但千萬別誤會這些本徵態會像振動的彈簧！



這些能量本徵態是定態，沒有任何測量會隨時間變化！

但如同波包，如果將定態疊加，就有可能製造出期望值會變的態。

調和態 Coherent State 就是最好的例子。

$$\boxed{a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle} \tag{17.3.5}$$

調和態 Coherent State 是a的本徵態。本徵值是給定的複數α。

This result is a bit shocking: we have found eigenstates of the *non-Hermitian* operator $\hat{a}$. Because $\hat{a}$ is not Hermitian, our theorems about eigenstates and eigenvectors of Hermitian operators do not apply. For example, the eigenvalues need not be real ($\alpha \in \mathbb{C}$), two eigenvectors with different eigenvalues need not be orthogonal (they are not!), and the set of eigenvectors need not form a complete basis (coherent states actually give an overcomplete basis!). We actually determined explicitly the eigenstates of the annihilation operator in example 13.21.

Exercise 17.5. *Ordering the exponential in the state $|\alpha\rangle$ in (17.3.2), show that*

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-|\alpha|^2/2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle.$$

Exercise 17.6. *Show that*

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \exp\left(-\tfrac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2) + \beta^*\alpha\right). \tag{17.3.7}$$

Hint: You may find it helpful to evaluate $e^{\beta^*\hat{a}+\alpha\hat{a}^\dagger}$ in two different ways using (17.2.23).

Exercise 17.7. *The above formula for the overlap $\langle\beta|\alpha\rangle$ does not make $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ manifest. Show that the above can be rewritten as*

$$\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha-\beta|^2}\, e^{i\,\mathrm{Im}(\beta^*\alpha)}. \tag{17.3.8}$$

When $\beta = \alpha$, both exponents vanish manifestly, and thus the overlap is clearly equal to one. Note that the result implies that $|\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = e^{|\alpha-\beta|^2}$.

計算調和態 Coherent State 的位置期望值：

$$x=\sqrt{\frac{1}{m\omega}}\,q=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a+a^{\dagger}\right)$$

$$a|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle$$

$$\langle\alpha|x|\alpha\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\left(a+a^{\dagger}\right)|\alpha\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\langle\alpha|a|\alpha\rangle+\langle\alpha|a^{\dagger}|\alpha\rangle\right\}$$

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\{\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle+(\langle\hat{a}\alpha|)|\alpha\rangle\}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\{\alpha+\alpha^{*}\langle\alpha|\alpha\rangle\}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha+\alpha^{*})$$

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha+\alpha^{*})=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}\alpha$$

類似的：

$$\langle\alpha|p|\alpha\rangle=\sqrt{2m\omega\hbar}\;\;\mathrm{Im}\alpha$$

To find the physical interpretation of the complex number α, we first note that when real, as in (17.3.1), α encodes the initial position x_0 of the coherent state. More precisely, it encodes the expectation value of $\hat{x}$ in the state at $t = 0$. For complex α, its real part is still related to the initial position:

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \frac{L_0}{\sqrt{2}}\langle\alpha|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = \frac{L_0}{\sqrt{2}}(\alpha+\alpha^*) = L_0\sqrt{2}\,\mathrm{Re}(\alpha), \tag{17.3.9}$$

where we used (17.3.5), both on bras and on kets. We have thus learned that

$$\mathrm{Re}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\langle\hat{x}\rangle}{L_0}. \quad \text{位置期望值是}\alpha\text{的實數部。} \tag{17.3.10}$$

It is natural to conjecture that the imaginary part of α is related to the momentum expectation value on the initial state. So we explore

$$\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{L_0}\langle\alpha|(\hat{a}^\dagger-\hat{a})|\alpha\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{L_0}(\alpha-\alpha^*) = \sqrt{2}\frac{\hbar}{L_0}\,\mathrm{Im}(\alpha) \tag{17.3.11}$$

and learn that

$$\mathrm{Im}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{L_0}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle. \quad \text{動量期望值是}\alpha\text{的虛數部。} \tag{17.3.12}$$

The identification of α in terms of expectation values of $\hat{x}$ and $\hat{p}$ is now complete:

$$\boxed{\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\langle\hat{x}\rangle}{L_0} + i\frac{L_0\langle\hat{p}\rangle}{\hbar}\right).} \tag{17.3.13}$$

$$\boxed{|\alpha, t\rangle = e^{-i\frac{1}{2}\omega t}|e^{-i\omega t}\alpha\rangle} \tag{17.3.19}$$

α的相角會隨時間而線性增加

This is how a coherent state $|\alpha\rangle$ evolves in time: up to an irrelevant phase, the state remains a coherent state with a time-varying parameter $e^{-i\omega t}\alpha$. In the complex α plane, the state is represented by a vector that rotates clockwise with angular velocity ω. The α plane can be viewed as having a real axis that gives $\langle\hat{x}\rangle$, up to a proportionality constant, and an imaginary axis that gives $\langle\hat{p}\,\rangle$, up to a proportionality constant. The evolution of any state is represented by a circle. This is illustrated in figure 17.2.

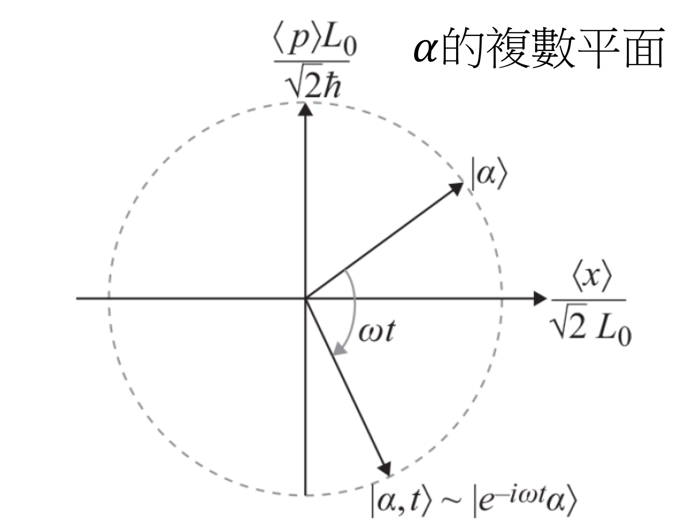
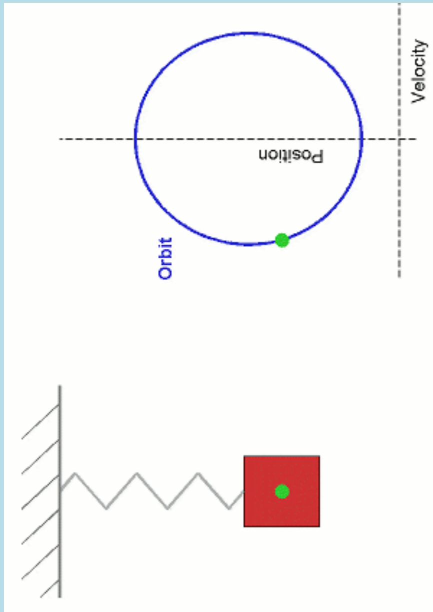


Figure 17.2
Time evolution of the coherent state $|\alpha\rangle$. The real and imaginary parts of α determine, respectively, the expectation values $\langle\hat{x}\rangle$ and $\langle\hat{p}\,\rangle$. As time goes by, the α parameter of the coherent state rotates clockwise with angular velocity ω.



調和態的位置與動量期望值真的像振動的彈簧！

$$\psi^{(\alpha)}(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\Re[\alpha(t)]\right)^2 + i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\Im[\alpha(t)]x + i\theta(t)\right) ,$$

where $\theta(t)$ is a yet undetermined phase, to be fixed by demanding that the wavefunction satisfies the Schrödinger equation.

It follows that

$$\theta(t) = -\frac{\omega t}{2} + \frac{|\alpha(0)|^2 \sin(2\omega t - 2\sigma)}{2} \text{, where} \qquad \alpha(0) \equiv |\alpha(0)| \exp(i\sigma) ,$$

so that σ is the initial phase of the eigenvalue.

The mean position and momentum of this "minimal Schrödinger wave packet" $\psi^{(\alpha)}$ are thus ***oscillating just like a classical system***,

$$\boxed{\langle \hat{x}(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\Re[\alpha(t)] = |\alpha(0)|\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\cos(\sigma - \omega t) ,}$$

$$\boxed{\langle \hat{p}(t)\rangle = \sqrt{2m\hbar\omega}\Im[\alpha(t)] = |\alpha(0)|\sqrt{2m\hbar\omega}\sin(\sigma - \omega t) .}$$

調和態的波函數是一波包。

波包的中心運動如簡諧震盪。

The probability density remains a Gaussian centered on this oscillating mean,

$$|\psi^{(\alpha)}(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - \langle\hat{x}(t)\rangle\right)^2} .$$