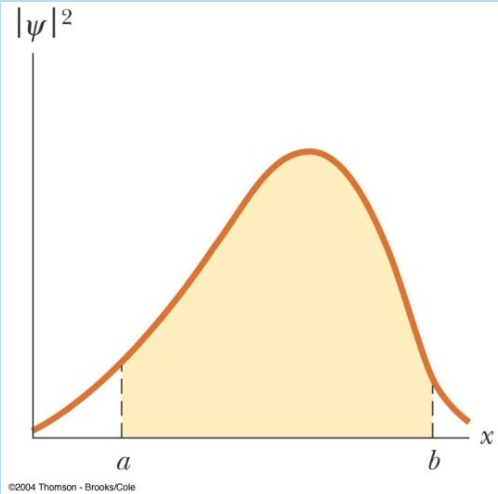
$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{n} Q_i P_i$$

位置的期望值即是以機率為權重對位置求和：

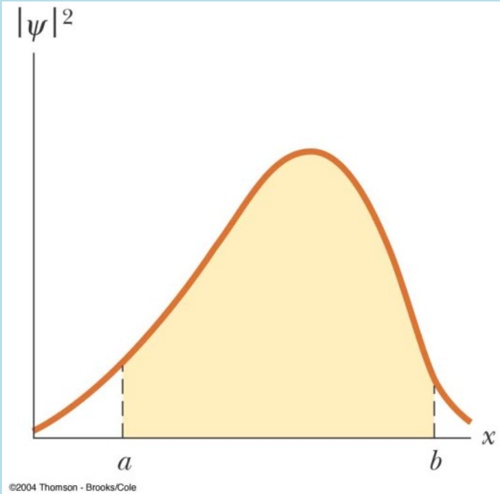
位置為連續變數，因此需做積分。

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



有了位置期望值的計算式：

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



任何位置函數、比如位能的期望值就可以用類似方式寫下。

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

我們可以用此式來計算位置的不確定性Δx！

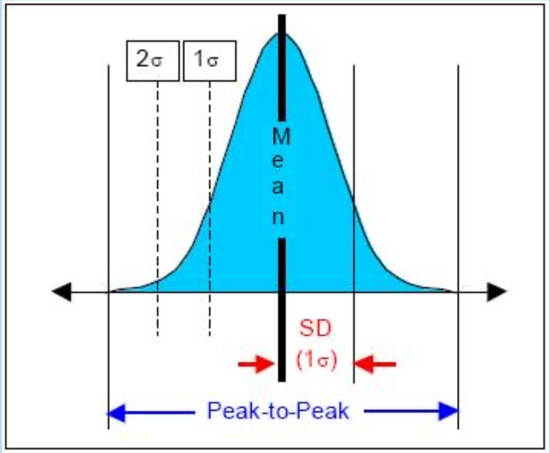
測量一個物理量$\hat{A}$時的不確定性，由測量結果分布的標準差ΔA來描述 ：

可定義為「測量值與期望值的差」的平方的期望值的開根號。

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

此式可化簡：

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



這兩個期望值都可以用波函數計算：

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

位置的不確定性Δx，現在可以精確定義與計算了。

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

讓我們試一下計算波包的不確定性$\Delta x, \Delta p$。

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \qquad a \equiv \frac{1}{\alpha}$$

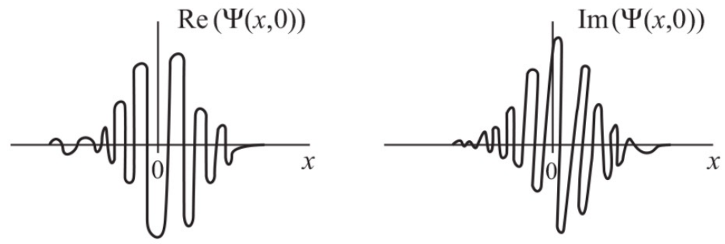
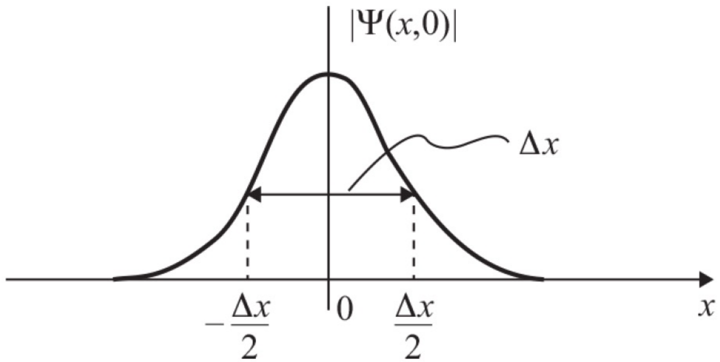


Figure 4.2
The real and imaginary parts of Ψ(x, 0).



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

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

首先要將波包函數歸一化：$C = \sqrt[4]{\frac{a}{\pi}}$

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

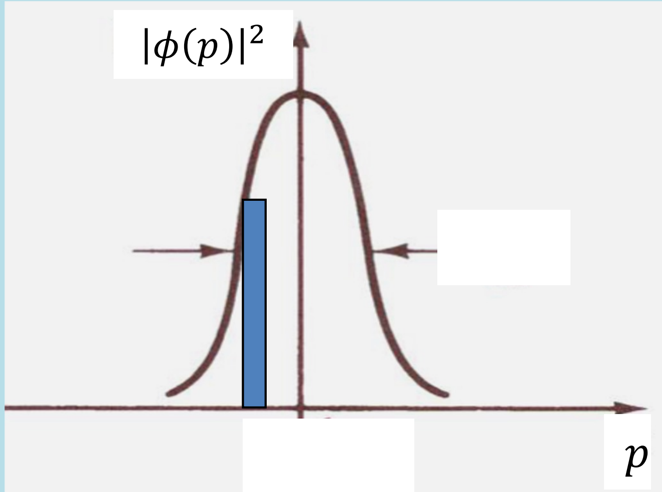
$$= -\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\partial}{\partial a}\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{a}\frac{1}{a\sqrt{a}} = \frac{1}{2a} = \frac{\alpha}{2}$$

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

動量的期望值怎麼算？

動量測量結果在p與$p + dp$之間發現的機率：

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



動量的期望值想當然爾：

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

期待：動量的函數，例如動能的期望值也可同樣方式記算：

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

動量空間波函數$\phi(p)$與波函數$\Psi(x,0)$互為傅立葉變換：

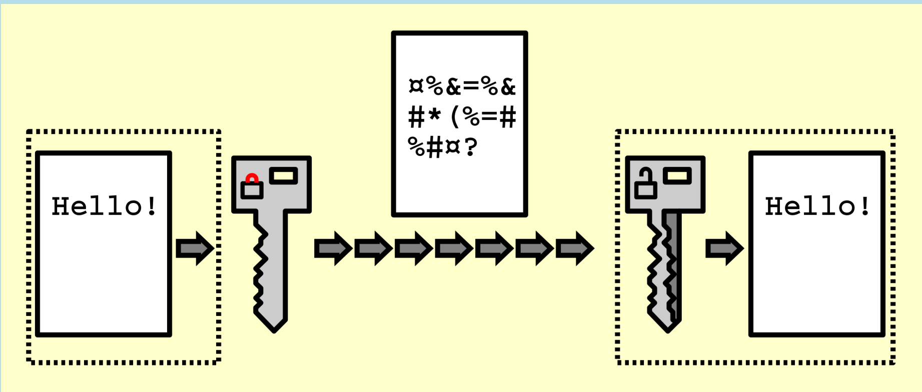
$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) \cdot e^{-ipx/\hbar} \cdot dx$$

$\Psi(x,0)$就是$\phi(p)$的反傅立葉變換Inverse Fourier Transform：

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

我們常說$\Psi(x,0)$的所有資訊都存在$\phi(p)$之中。

有了$\phi(p)$就能算出$\Psi(x,0)$，反之亦然！有點像Encryption加密。



大膽推想：動量的函數（比如動能）的期望值

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

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

例如漢米爾頓量的期望值$\langle \hat{H} \rangle$：

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

2. A particle's wavefunction at $t = 0$ is:

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x) \quad 0 < x < a,$$

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

Calculate the expectation values: $\langle x^2\rangle, \langle p^2\rangle$. (25) 提示：$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

解答：

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi^*(x) \cdot \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi(x) = -\frac{30}{a^5}\hbar^2 \int_0^a dx \cdot x(a-x)\frac{\partial^2 x(a-x)}{\partial x^2}$$

$$= \frac{30}{a^5}\hbar^2 \int_0^a dx \cdot x(a-x) \cdot 2 = \frac{60}{a^5}\hbar^2\left(\frac{a^3}{2} - \frac{a^3}{3}\right) = \frac{10}{a^2}\hbar^2$$

In $\langle p^2\rangle$, you must keep the two derivatives in the middle to get the right answer. To see why, check out my careful discussion in the PowerPoint file. You cannot move derivative operators around in your formula. That is a key diffe

當初只是幫助猜想的翻譯表，現在可以稍加修改，正式地搬上量子力學檯面，

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

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

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

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

有古典對應的物理量就用與古典一樣的形式來組合位置與動量算子：

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

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

古典　　　　　　　　量子

大膽地假設，所有物理量都對應作用於波函數的運算算子！

該物理量的期望值，就是此運算作用於狀態的波函數，

乘上波函數的複數共軛，最後對空間積分！

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

為簡單起見，取$p_0 = k_0 = 0$：

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

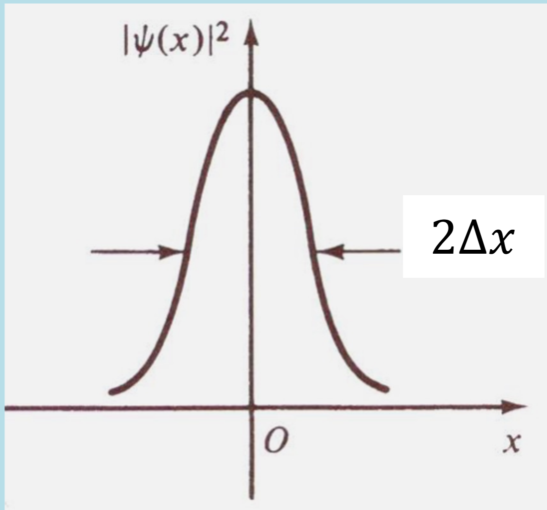
$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$$

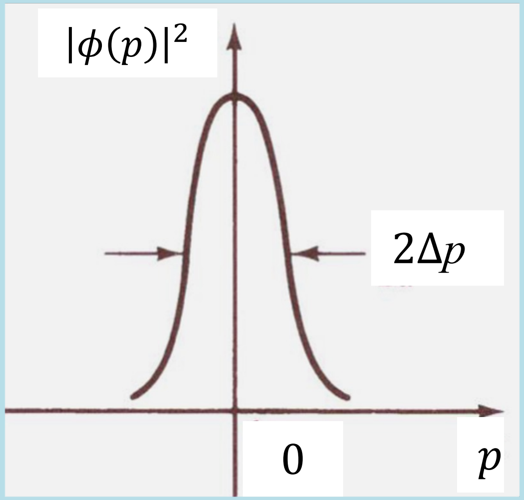
波包的$\phi(p)$也是高斯分佈，也滿足歸一化條件。因此：

現在我們可以用同樣的積分式計算波包的動量不確定性Δp：

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

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





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

定態波函數，時間部分與空間部分可以分離：

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

代入薛丁格方程式：

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

得到：

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

左右都除以 $\psi(x) \cdot \phi(t)$ ：

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

現在左邊只與x有關，右邊只與t有關，兩者是獨立變數！

這不可能，唯一例外是左右兩式與兩者都無關，是一常數。設為E。

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

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

定態波函數，時間部分不只可以被分離，而且可以被完全決定，

時間部分與位能$V(x)$的關係完全濃縮在一個常數E之中！

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

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

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

如同自由電子波一樣！

$E = \hbar\omega$顯然就是能量。

大膽推測：對這些解， E就是能量的測量結果，

之後我們將正式證明對於定態，能量的測量的確沒有不確定性！ $\Delta E = 0$

可以被分離的波函數，

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

$\psi_E(x)$是時間為零時的瞬間波函數$\Psi(x,0)$，$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$是未來的演化evolution。

量子波函數若可以分離，稱為定態，它所有可測量的量都與時間無關。

機率密度 $P=|\Psi|^2=\left|\psi_E(x)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right|^2=|\psi_E(x)|^2\left|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right|^2=|\psi_E(x)|^2$ 與時間無關。

其他物理測量的期望值也都與時間無關！

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

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

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

時間只改變了$\psi_E(x)$在複數平面的相角 Phase。

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

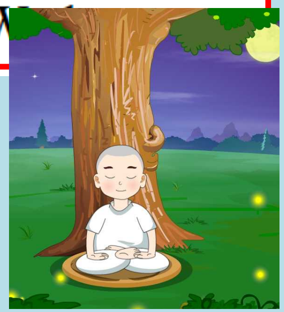
因此可以說定態的電子一直是處於同一個狀態！就是$\psi_E(x)$所決定的電子狀態。

空間部分函數$\psi_E(x)$沒有隨時間變！只是換了不同版本！

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

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

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



因此起始條件若在定態，此電子就會一直留在此定態！

無人打擾時，電子會獨立逗留的狀態，就是定態。

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

定態解的特點是：時間部分與空間部分分離。

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

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

$\psi_E(x)$滿足此常微分方程式：

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

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

Time-Independent Schrodinger Equation

與時間無關之薛丁格方程式。

與時間無關之薛丁格方程式。

定態波函數的空間部分所滿足的方程式：

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

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

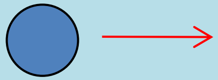
$$\Psi(x,t)=\psi_E(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

方程式中不再有i，解可以是實數。

這是一個典型古典物理的Sturm-Liouville Theory!

從非束縛態開始。首先是大家已經很熟悉的自由電子波，這是定態！

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



當電子受力為零時，位能V是一常數， $V(x) = V_0$

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

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

動能

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

很容易猜到這就是角波數。

其解很簡單，二次微分後與自己成正比，就是指數函數 $\frac{d^n}{dx^n}e^{ax} = (a)^n \cdot e^{ax}$

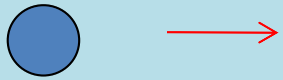
$a^2 = -k^2$ $a = \pm ik$ a有兩個解！

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

這是二次微分方程式，上式有兩個未知係數，因此已經是最普遍的解了

從非束縛態開始。

首先是大家已經很熟悉的自由電子波，這也是定態！



當電子受力為零時，位能V是一常數， $V(x) = V_0$

不直接設為零，是因為所得結果，將來可以在其他一維階梯狀位能直接引用。

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

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

假設 $E > V_0$

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

動能

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

很容易猜到這就是角波數。

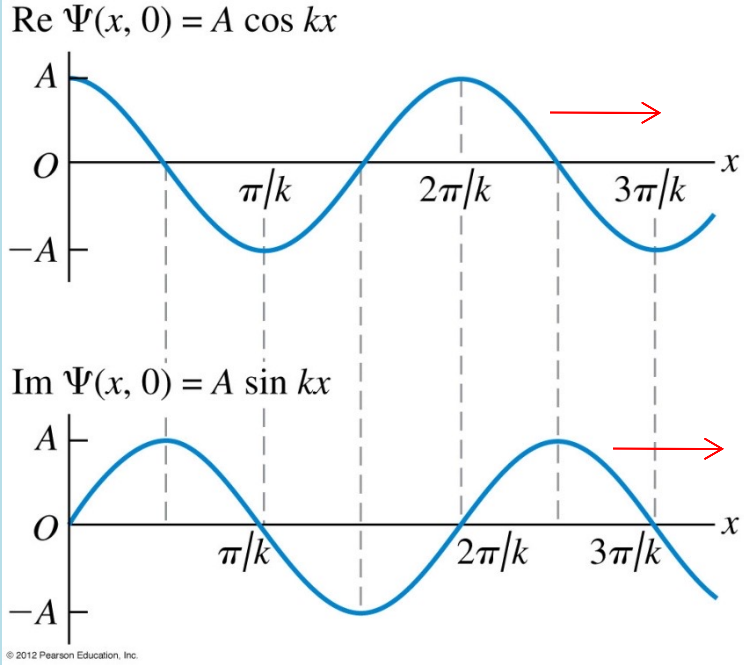
其解很簡單，二次微分後與自己成正比，就是指數函數 $\frac{d^n}{dx^n}e^{ax} = (a)^n \cdot e^{ax}$

$a^2 = -k^2$ $a = \pm ik$ a有兩個解！

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

這是二次微分方程式，上式有兩個未知係數，因此已經是最普遍的解了

自由空間的電子定態



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

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

完整的波函數：

$$\Psi(x,t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = Ae^{i\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}x - \frac{E}{\hbar}t\right]} + Be^{-i\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}x + \frac{E}{\hbar}t\right]}$$

相位分別向$+x$與$-x$方向運動！這當然就是已經解過的平面正弦自由電子波。

當時以角波數k來標記，k決定$\omega(k)$，現在倒過來以能量E來標記，決定$k(E)$。

任意的E數值，只要大於V_0，定態方程式都有解！能量值是連續分布的。

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

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

單一角波數k的電子波定態，波長確定，動量確定，機率密度為一常數。

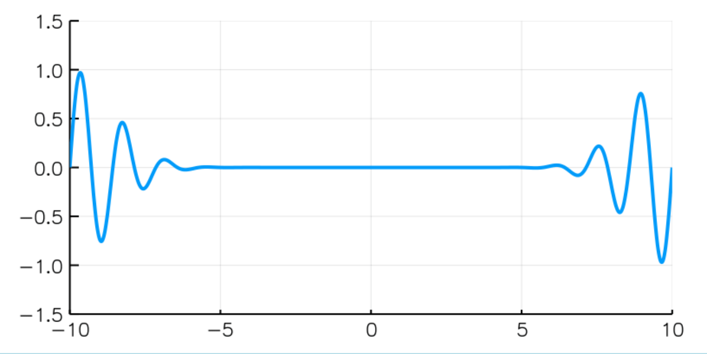
沒有任何位置資訊，

它只是擁有+x方向的動量，但並沒有任何東西是在傳播之中。

畢竟這是定態的電子，它的物理當然完全不隨時間變化。

波包並不是定態，而是能量接近、類似的定態的疊加。

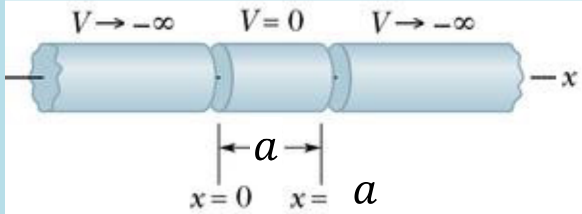
所以中心位置，及位置平均值會移動！

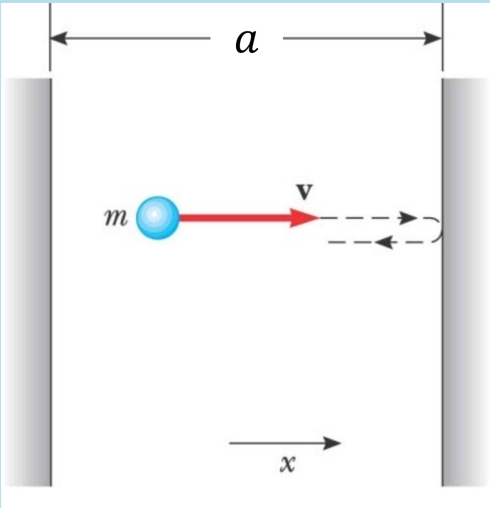


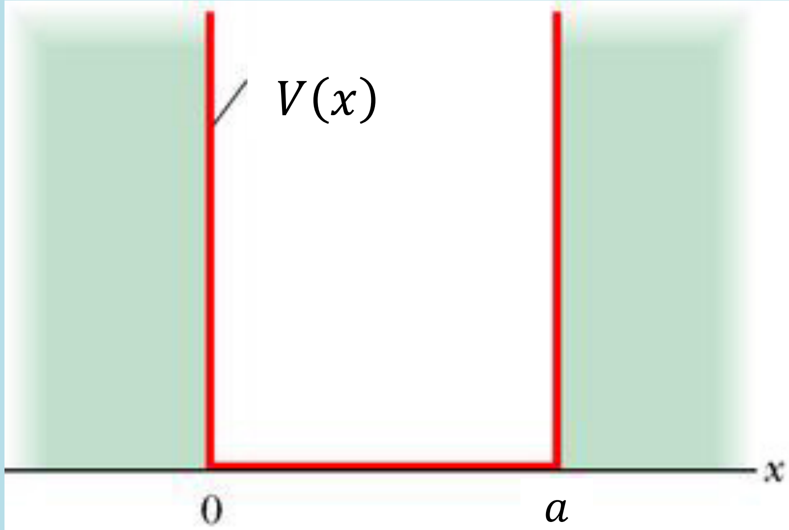
接著討論一個典型的束縛態。

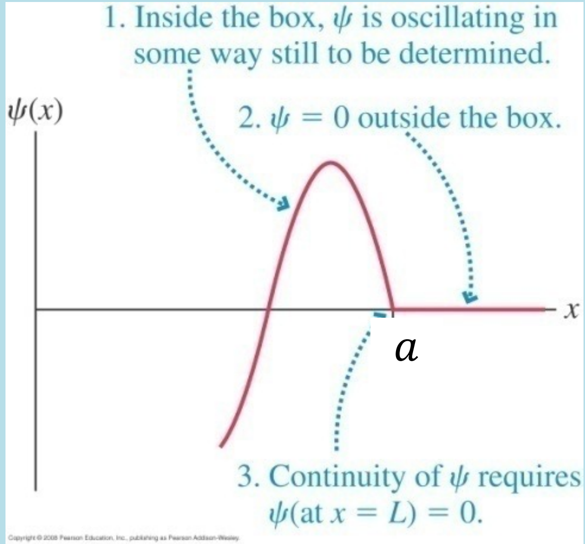
無限位能井，盒子中自由電子的定態。

$$V(x) = \infty \qquad x < 0$$
$$= 0 \qquad 0 < x < a$$
$$= \infty \qquad a < x$$









邊界外的位能是無限大，波函數必須為零。否則位能期望值會是無限大！

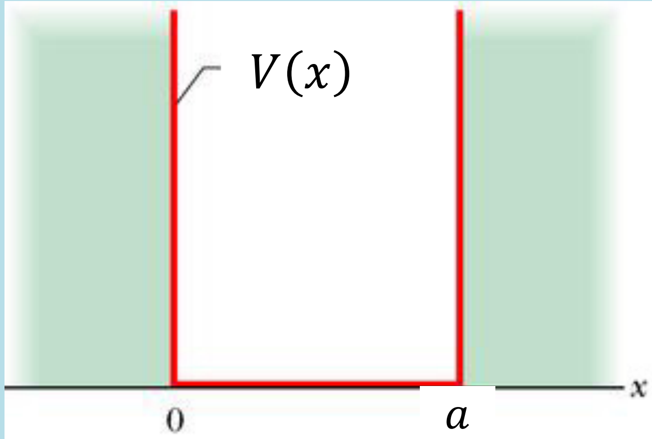
邊界內波函數，必須在邊界上與邊界外波函數連續，

因此邊界內波函數在邊界上必須為零。

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

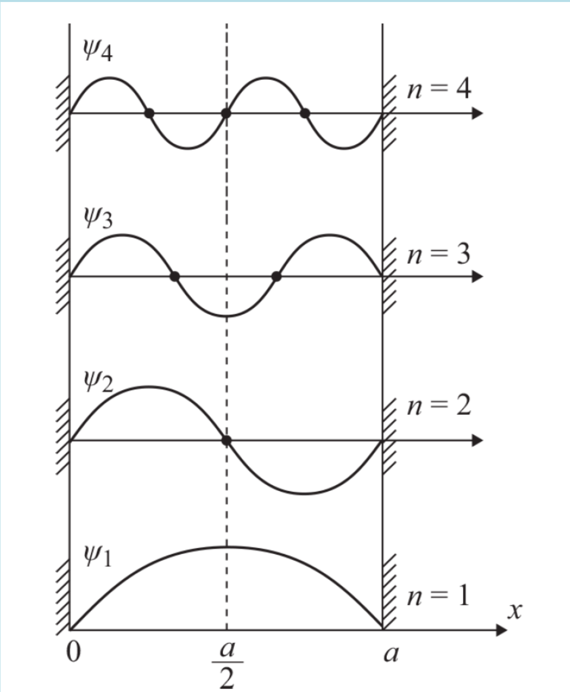
$\psi_E(0) = 0$ $\quad$ $\psi_E(a) = 0$

有邊界之自由電子



邊界條件：

$\psi_E(0) = 0$　$\psi_E(a) = 0$



在邊界內，如同自由電子，因此可延用自由電子波。

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

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

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

但必須加上邊界條件：

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

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

$\psi_E = C\sin kx$　重新定義常數：$C \equiv 2iA$

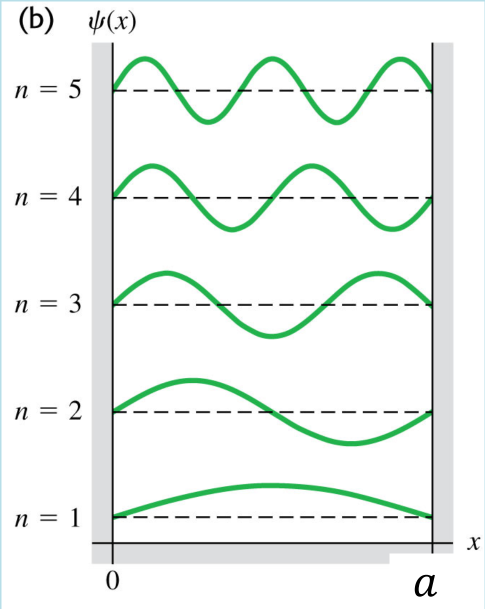
$$\psi_E(a) = 0 \longrightarrow \psi_E(a) = C\sin ka = 0$$

$$\downarrow$$

$ka = n\pi$　n是自然數。

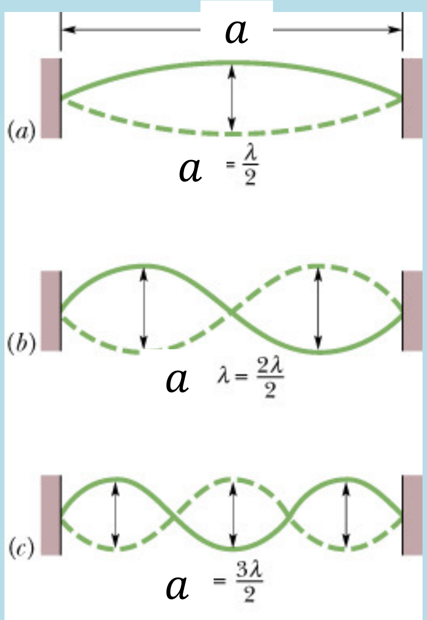
$$\psi_n = C\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad k = \frac{n\pi}{a}$$

結果與弦波駐波的波函數的空間部分幾乎一模一樣！



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

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



解可以以量子數n編號，給它一個新的符號u_n：

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

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

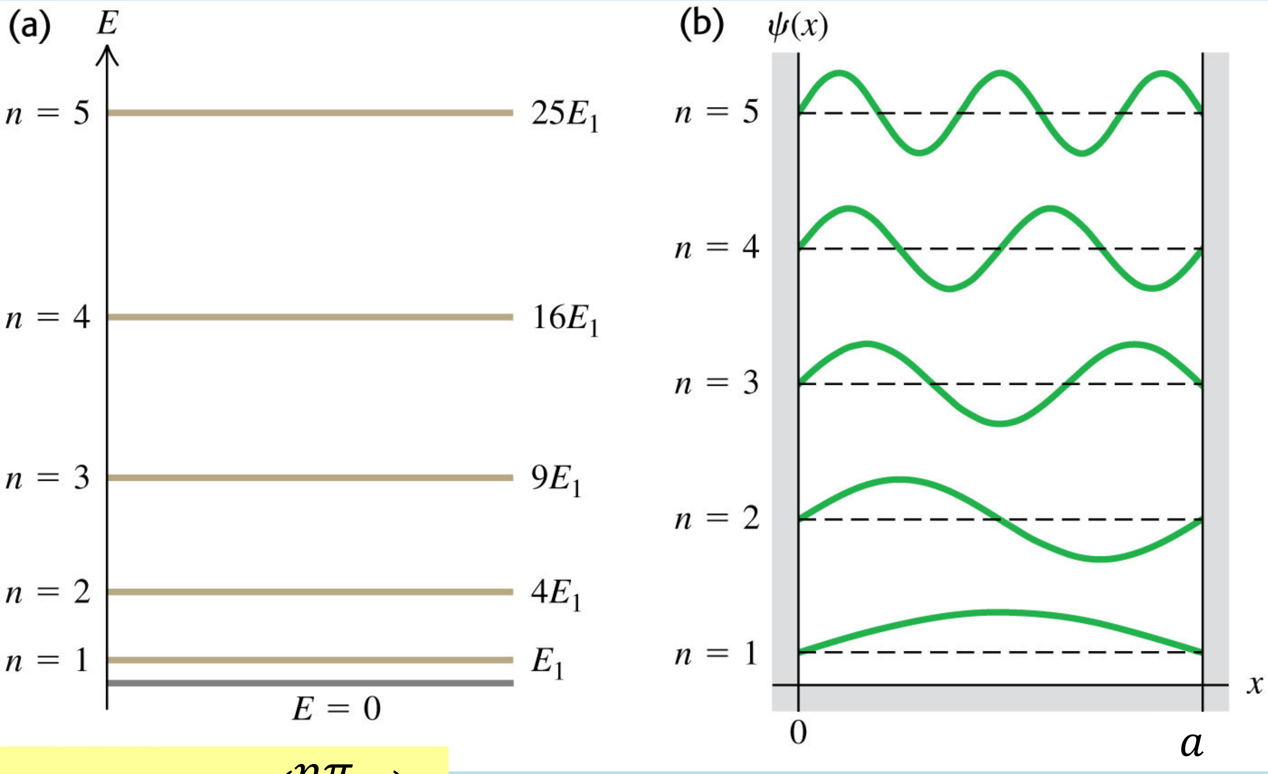
原則上常數C可以是任意複數。

但只有C的絕對值對物理有影響，常常就取C為實數。如此u_n就完全是實數函數，

但波函數Ψ_n還要乘上時間的部分。完整的解並不是實數！

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

有邊界之電子束縛態波函數的實數部如同駐波，但它必得有虛數部。



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

代回去與時間無關的薛丁格方程式：

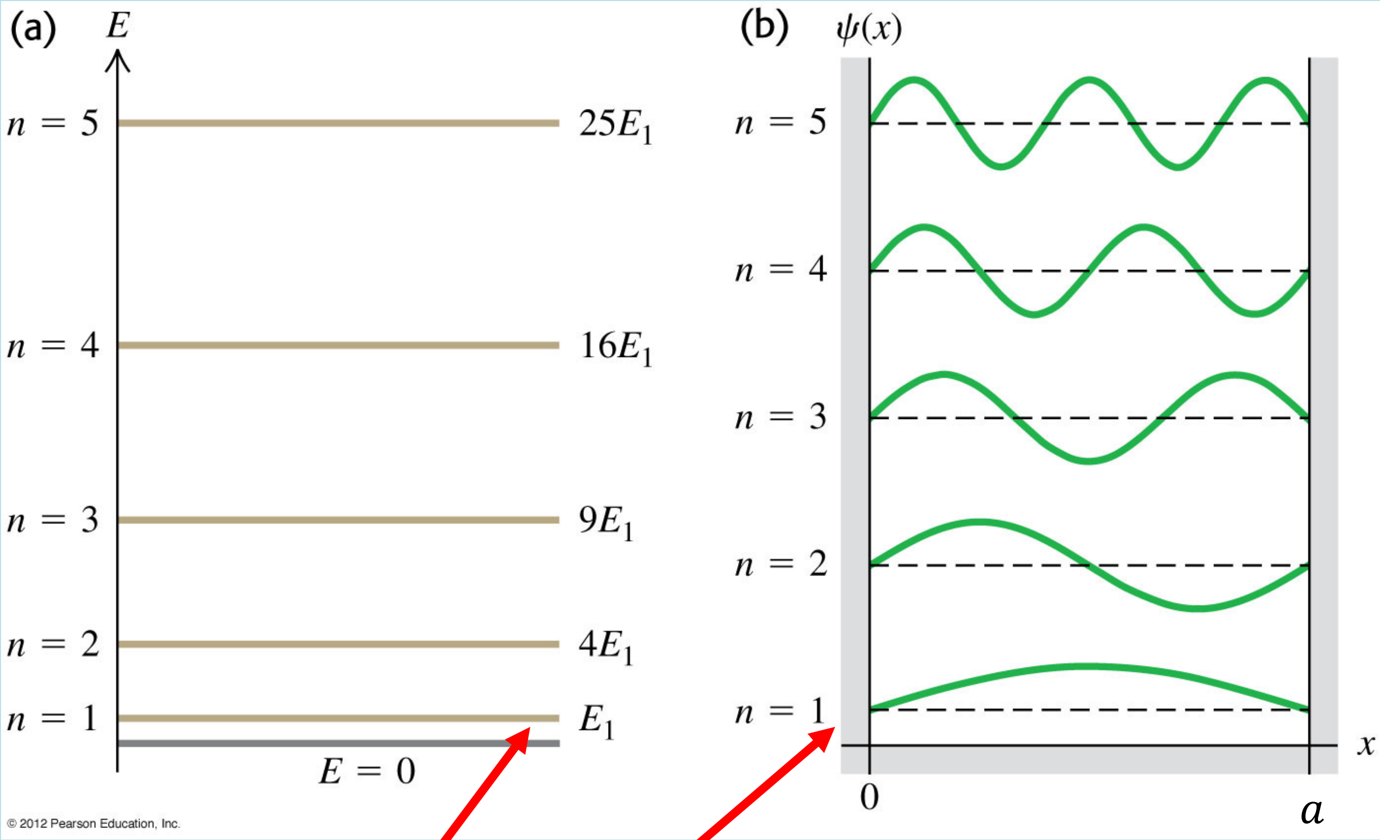
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = E\psi_E(x) = \boxed{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}n^2}\psi_E(x)$$

能量E等於：

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

能量只有在這些值，與時無關薛丁格方程式才有滿足邊界條件的解！

這些定態，能量是量子化。將會證明無限位能井的任意解，能量測量值只會是E_n。



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

有一能量最低的基態，能量不為零！

注意基態的動量不為零。

電子是靜不下來的！

這是測不準原理的結果。

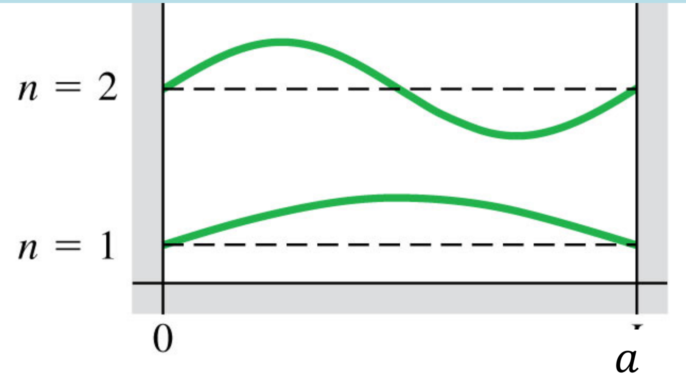
總機率必須等於 1 $$\int_0^a |\Psi_n(x,t)|^2 dx = \int_0^a |u_n(x)|^2 dx = 1$$

由歸一化條件可以解出係數 C

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

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

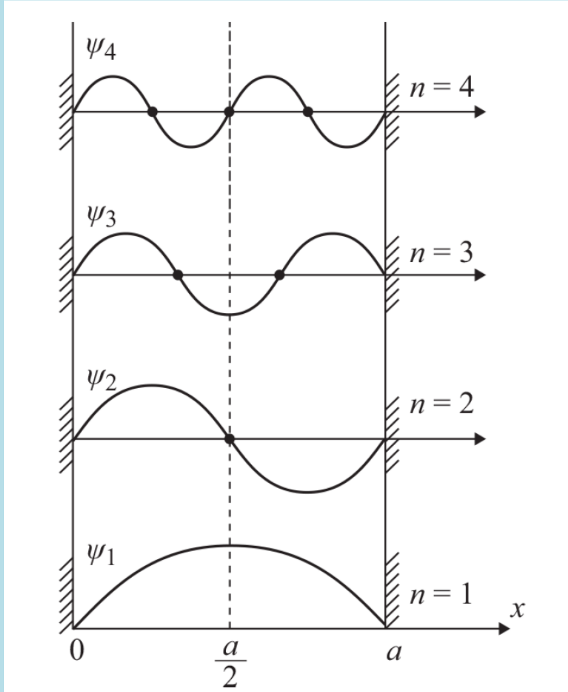
只有C的絕對值對物理有影響。所以常就直接取實數。



機率密度

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

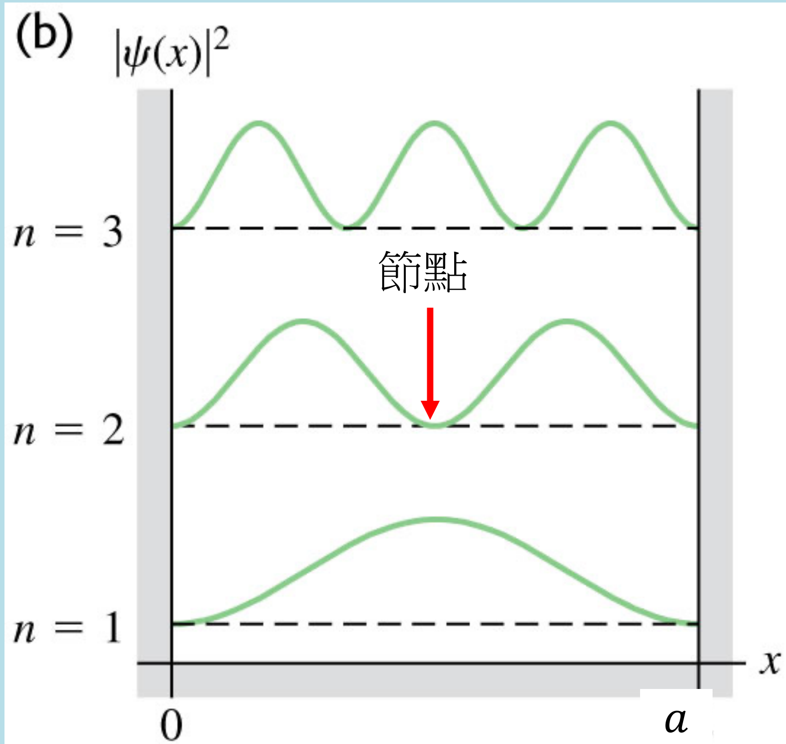
$$P\left(\frac{m}{n}a\right) = 0, m < n$$ 稱為節點。



在節點處，P一直為零，永遠不可能發現該電子！

此電子靜不下來，但在節點卻永遠找不到它！

注意：$n-1$即是節點數目！

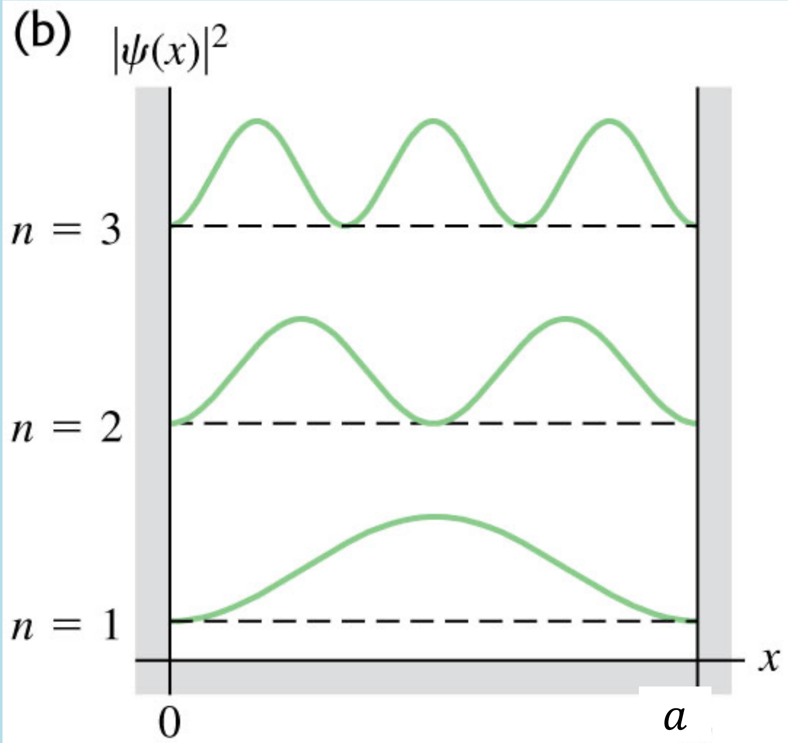


我們很容易就計算這些定態解的各個期望值：

因為對稱的關係：

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

$\langle x^2\rangle$ =? 習題！



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

$$= -i\hbar\int_0^a dx \cdot u_n(x)\left(\frac{d}{dx}u_n(x)\right) = \int_0^a dx \cdot \frac{d}{dx}u_n^2$$

$$= \frac{-i\hbar}{2}[u_n^2(a) - u_n^2(0)] = 0$$

$$\langle p\rangle = 0$$

$\langle p^2 \rangle = ?$

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

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

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

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

我們得到動量測量的不準度：

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

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

而且得到動量平方的期望值就是能量$2mE_n$ ！

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

這應該表示：

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

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

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：

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

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

這就是傅立葉分析！

$t = 0$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。

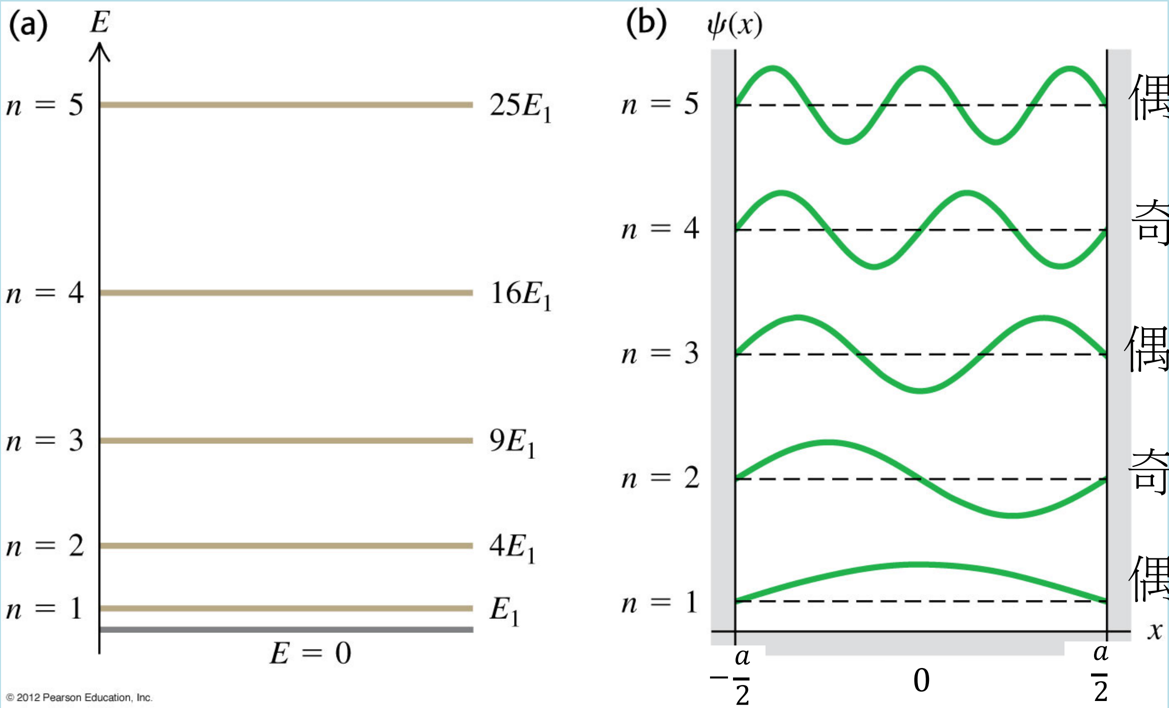
$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

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。

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。



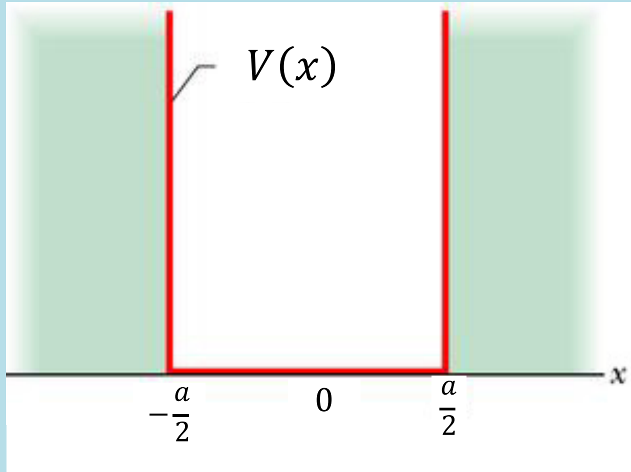
偶函數

奇函數

偶函數

奇函數

偶函數



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

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。

動量算子$\hat{p}$定義為空間微分運算，那有位能時的能量算子可以寫成：

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$\hat{p} \equiv -i\hbar\frac{d}{dx}$$

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

漢米爾或稱能量算子就定義為動量算子的平方加上位能算子。

薛丁格方程式就可以寫為：

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

$$\Downarrow$$

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

這就是量子力學完整的薛丁格方程式。

漢米爾頓、能量算子$\hat{H}$決定了狀態隨時間的演化，如同翻譯表所暗示的。

與時間無關的薛丁格方程式也可以以$\hat{H}$運算子表述：

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

左邊就是量子力學中對應的Hamiltan運算子：

固定能量解ψ_E滿足與時間無關的薛丁格方程式可以寫成：

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

也就是：

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

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

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

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。

能量的本徵函數，之前稱為定態，有很多重要的性質！

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

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

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

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

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

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

計算本徵函數u_n描述的電子狀態的能量測量不確定性：ΔH。

$$(\Delta H)^2 \equiv \left\langle \left(\hat{H} - \langle \hat{H} \rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle \hat{H}^2 - 2\langle \hat{H} \rangle \hat{H} + \langle \hat{H} \rangle^2 \right\rangle = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - E^2$$

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

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

$$\Delta H = 0$$

處於定態ψ_E的電子，能量的測量值為E，完全沒有不確定性！

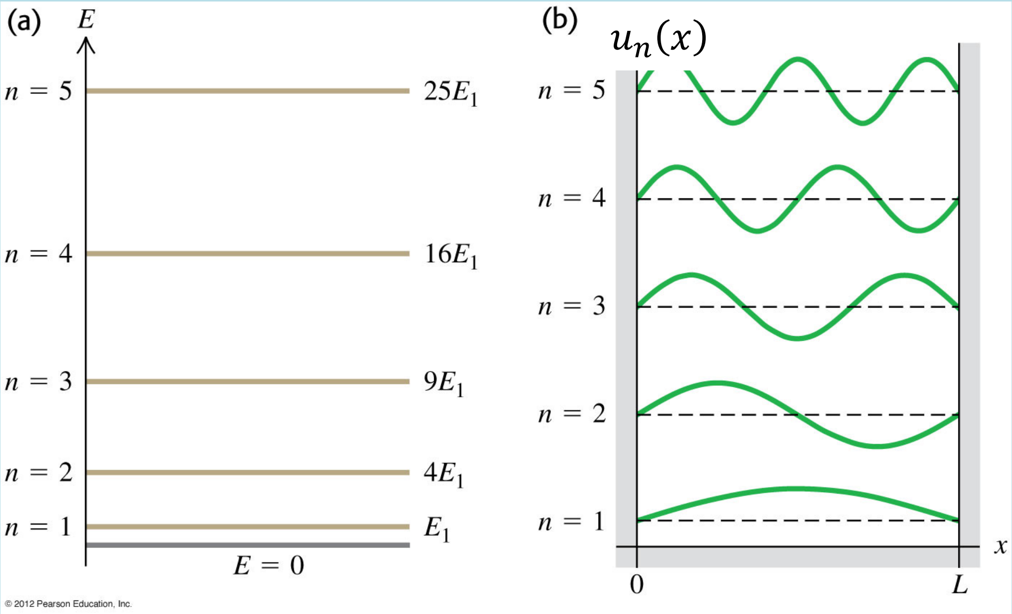
可以說定態ψ_E是具有特定確定能量的測量值為E的狀態。

無限大位能井$\hat{H}$的本徵函數滿足：

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

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

$(\Delta H)^2 = 0$



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

這樣的態有什麼用？

對任一狀態$\psi(x)$作能量的測量，若所得到的結果是某值，

剛測量完時，立刻再作一次能量測量，結果一定確定還是同樣的值，無不確定性。

因此$\Delta H = 0$，此時一定存在於某一個本徵態！

那麼、剛剛測得的能量結果一定只能是某一本徵值E_n！

驚人的：在此位能中任意一次能量測量結果只能是某本徵值E_n，不會測到其他值。

到此，無限大位能井內，電子能量的量子化完全確立！不一定是在定態。

解能量算子本徵值、是在決定測量能量時會得到什麼結果：只會是E_n其中之一。

這個本徵函數、本徵值與測量的關係可以推廣到其他的物理量$\hat{A}$：

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

本徵函數
Eigenfunction

本徵值
Eigenvalue

算子化為數 $\hat{A} \rightarrow a$

直覺上，這個關係可以解讀為：算子$\hat{A}$作用於本徵函數的效果與數一樣，

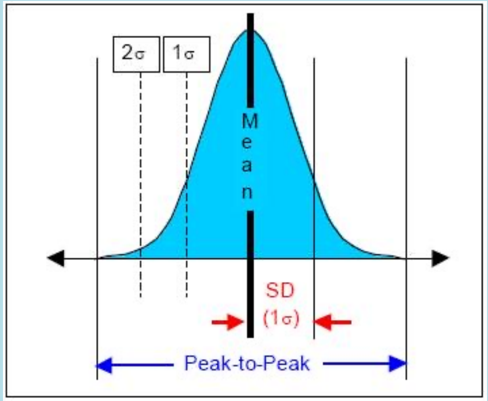
隱含：物理量$\hat{A}$測量時如古典量，也就是有確定的值。

狀態ψ_a時，該物理量算子$\hat{A}$的期望值：

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

a值就是測量期望值。

狀態ψ_a，物理量算子$\hat{A}$的測量不準度：



$$\Delta A \equiv \left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle^2 \right\rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

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

$$= a \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_a^*(x) \cdot \hat{A}\psi_a(x) = a^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi_a^*(x)\psi_a(x) = a^2$$

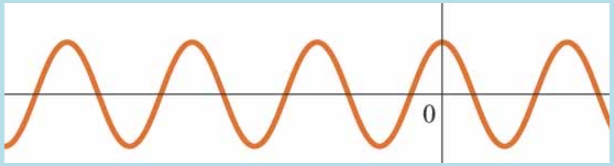
$$\Delta A = 0$$

物理量算子$\hat{A}$的本徵態，測量該量的期望值即為本徵值a，不準度為零。

對一物理量測量結果確定的狀態就是該物理量算子$\hat{A}$的本徵態ψ_a。

對於自由粒子波狀的態，動量是確定的（但位置測量不確定）：

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



這果然如預期是動量算子的本徵函數：

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

$$\Delta p = 0$$

剛剛作完位置測量的粒子，設其位置為 x_0，則其波函數只有在此處不為零！

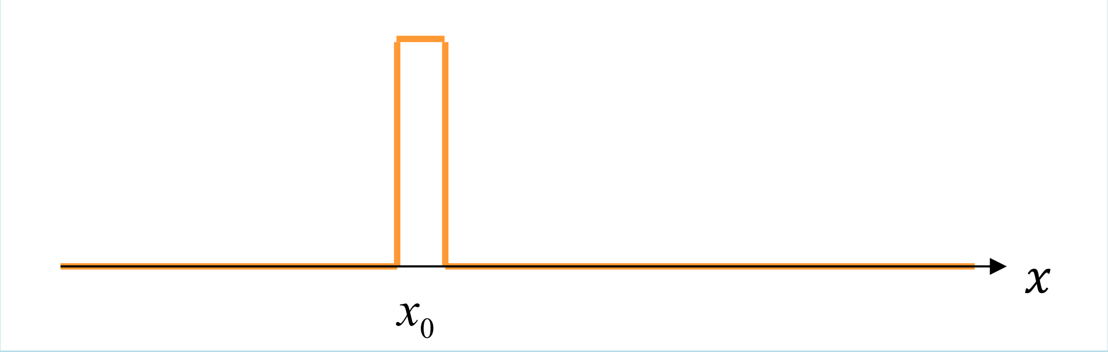
波函數是一個delta function！

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

這是位置算子$\hat{x}$的本徵函數：

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

$$\Delta x = 0$$



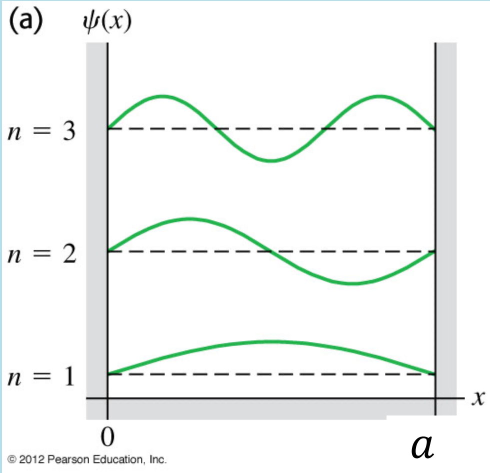
我們以無限位能井的能量本徵函數u_n為例，

來介紹任意算子的本徵函數普遍具有的幾個重要性質。

大致分為兩部分：展開與測量！

無限位能井的能量本徵函數u_n滿足正交定理，Orthogonality。

不同本徵值的本徵函數彼此正交！正交的意思是：



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

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

根據傅立葉分析，滿足邊界條件的任何函數$\psi(x)$，

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

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

此展開神似向量以基底展開，讓我們沿用向量語言，把展開係數c_n稱為分量。

分量components c_n可以利用u_n彼此正交的特性計算出來：

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

代入ψ的展開。

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

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

任何可行的狀態函數，都可以展開成能量的本徵函數u_n的疊加！

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

EXAMPLE 3-5

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

$$\psi(x) = A(x/a) \qquad 0 < x < a/2$$
$$= A(1 - x/a) \qquad a/2 < x < a$$

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

SOLUTION We want to calculate A_n in the expansion

$$A_n = \int_0^a dx\, \psi(x) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

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

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

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

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

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

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

so that

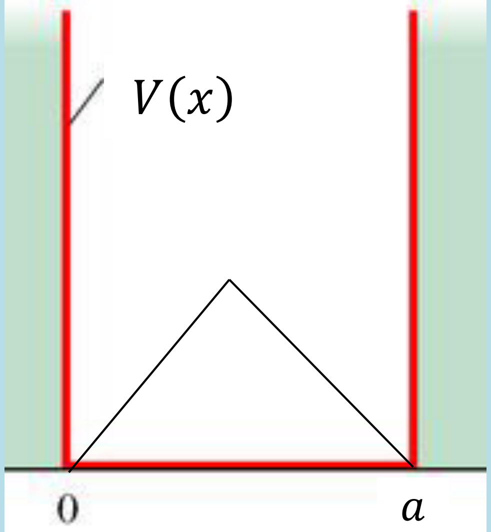
$$\boxed{\begin{aligned}|A_n|^2 &= \frac{96}{\pi^4 n^4} && \text{for } n \text{ odd}\\ &= 0 && \text{for } n \text{ even}\end{aligned}}$$

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

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

that the sum of all the probabilities is 1:

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



一系列能量的本徵函數u_n滿足：

展開定理：任一狀態ψ可以u_n作展開。展開讓我們聯想到向量以基底展開：

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

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，展開與正交定理，就如同向量空間的向量分析一模一樣！

能量的本徵函數u_n形成一組完整的基底。

任一狀態函數可以此基底作展開，疊加係數c_n就如同向量對一組基底的分量。

我們可以利用計算在此狀態ψ下能量的期望值來驗證以上猜測！

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

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

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

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

$$= \sum_n E_n c_n c_n^* = \sum_n E_n \cdot |c_n|^2$$

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

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

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

可見$|c_n|^2$就是測量能量時，得到結果是E_n的機率！

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

Measurement Theorem 測量定理

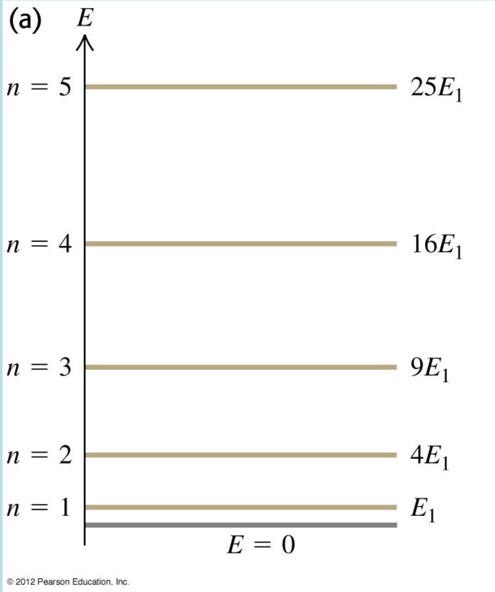
這強烈暗示測量能量時，得到結果只能是E_n其中之一！不會測到其他的值。

如果真是如此，機率總和必須等於1！

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

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

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



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

沒有遺漏，可見對能量的測量結果只能是本徵值E_n其中之一，不能是其他的值。

如果還會測到其他值，總機率就要超過1了！

到此，無限大位能井內的電子，不一定是在定態，能量的量子化完全確立！

對任一狀態$\psi(x)$作能量的測量，若所得到的結果是某一E_n，

剛測量完時，立刻再作一次能量的測量，結果一定確定還是E_n，

測量結果確定的狀態就是該物理量算子的本徵態。

可見第一次剛測完時，粒子狀態應該就是本徵函數$u_n(x)$。

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

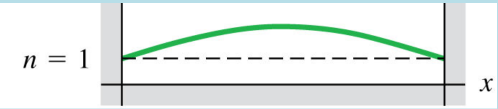
$$\boxed{\psi(x) \xrightarrow[\hat{H}\to E_n]{} u_n(x)}$$

當然每一次測量結果不會是確定的！崩潰變成的狀態也就不確定。

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

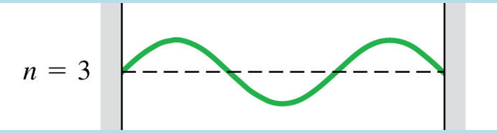
$E = E_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}$

$P_1 \sim 1$



$E = E_3$

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

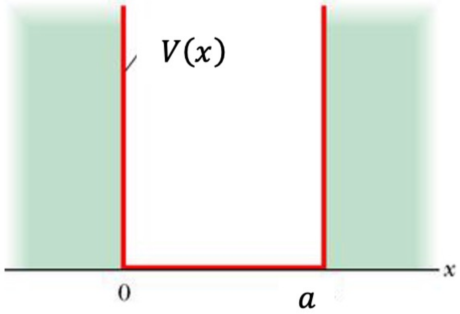


$\cdots$

但不會測到E_{2m}。

3. Consider an infinite potential box, with boundaries at $x = 0$ and $x = a$:

$V(x) = \infty, x > a, x < 0$ and $V(x) = 0, 0 < x < a$.



As we have shown in class, in this potential the energy eigenstate can be written as $\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ with eigenvalues $E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}n^2$ (you can use the notation E_n to simplify your answers) . Assume the wavefunction of a particle at $t = 0$ (probability already normalized to one) is:

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right) \qquad 0 < x < a,$$

$$= 0 \qquad x < 0, x > a$$

A. At $t = 0$, make an energy measurement. What are the values it could possibly give? What are the corresponding probabilities? Do they add up to one? What is the expectation value of energy. (20)

Hint: Expectation value is the sum of the measured value times the probability.

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right) \quad 0 < x < a,$$

$$= \sqrt{\frac{4}{5}}u_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}u_2(x)$$

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi^*(x) \cdot \hat{H} \cdot \left[\sqrt{\frac{4}{5}}u_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}u_2(x)\right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \left[\sqrt{\frac{4}{5}}u_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}u_2(x)\right] \cdot \left[\sqrt{\frac{4}{5}}E_1u_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}E_2u_2(x)\right]$$

$$= \frac{4}{5}E_1 + \frac{1}{5}E_2 = |c_1|^2E_1 + |c_2|^2E_2$$

$$\frac{4}{5} + \frac{1}{5} = 1$$

測量結果 機率

As we have shown in class, in this potential the energy eigenstate can be written as $\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ with eigenvalues $E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\pi^2}{a^2}n^2$ (you can use the notation E_n to simplify your answers) . Assume the wavefunction of a particle at $t = 0$ (probability already normalized to one) is:

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right) \quad 0 < x < a,$$

Screenshot

A. At $t = 0$, make an energy measurement. What are the values it could possibly give? What are the corresponding probabilities? Do they add up to one? What is the expectation value of energy. (20)

Hint: Expectation value is the sum of the measured value times the probability.

解答：

A. $\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{4}{5}}u_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}u_2(x)$. The wave function is a superposition of the eigenfunction u_1, u_2 of eigenvalues E_1, E_2, with amplitudes $c_1 = \sqrt{\frac{4}{5}}, c_2 = \sqrt{\frac{1}{5}}, c_n = 0, n > 2$. You can simply see it from the formula or use the formula $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x)$ and orthogonality theorem $\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn}$ to get it. The energy could only be E_1 or E_2. The corresponding probabilities are the square of the magnitudes c_1 and c_2: $\frac{4}{5}$ and $\frac{1}{5}$ 。

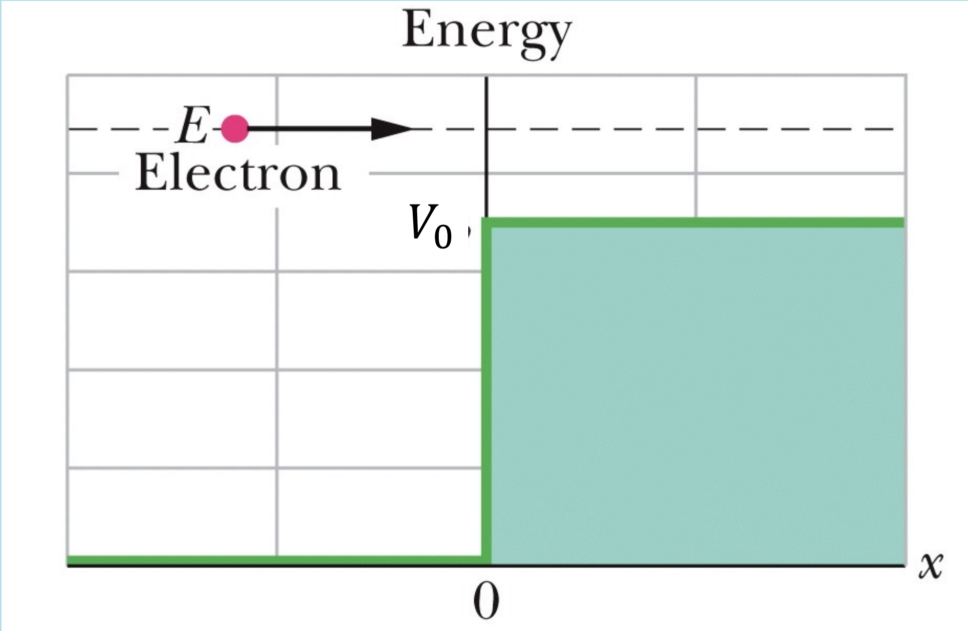
Screenshot

階梯狀位能散射

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

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

$$E > V_0$$



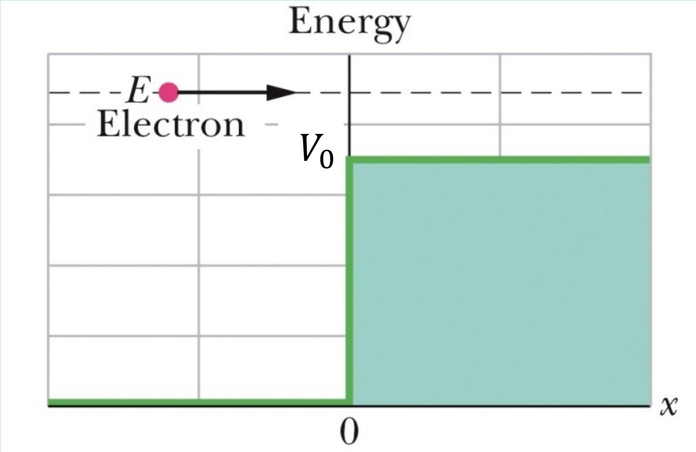
解這個位能下的定態，即能量的本徵函數。

也就是解與時間無關的薛丁格方程式。

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

反射與透射

在兩個區域內分別都是自由粒子，自由電子波定態解可以適用：



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

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

$x > 0$ $$\psi_E = Te^{iqx}$$

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

若只考慮由左入射的波，e^{-iqx}的部分可忽略。

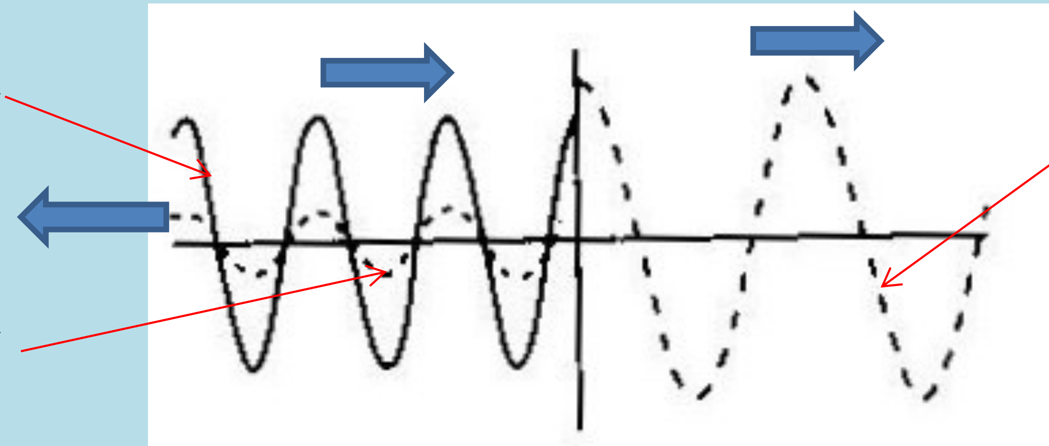
$k > q$ $\lambda_1 < \lambda_2$

角波數不同！

由左向右入射的正弦波，在邊境產生向右的透射波，及向左的反射波。

入射波

反射波



透射波

由左向右入射的波，嚴格應該用波包處理，

但我們先以自由電子波e^{ikx}近似，所以就取$A=1$。

$x<0$　$\psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx}$　$\psi' = ike^{ikx} - ikRe^{-ikx}$

$x>0$　$\psi_E = Te^{iqx}$　$\psi' = iqTe^{iqx}$

ψ及ψ'在邊界原點$x=0$連續，可以得到兩個連續條件，正好求解得R,T。

$1+R=T$

$k-kR=qT$

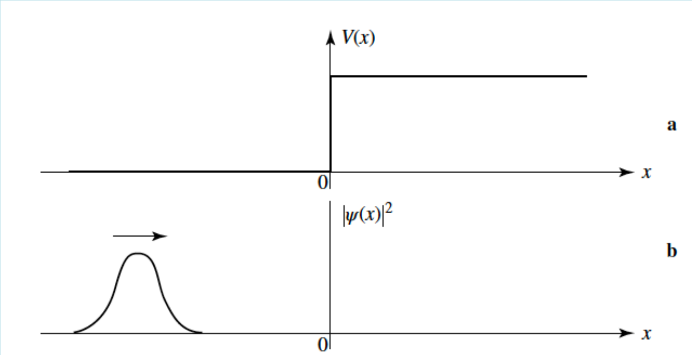
$\Rightarrow$

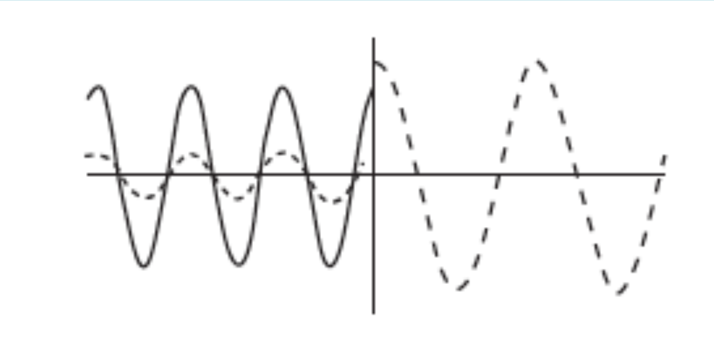
$$R = \frac{k-q}{k+q}$$

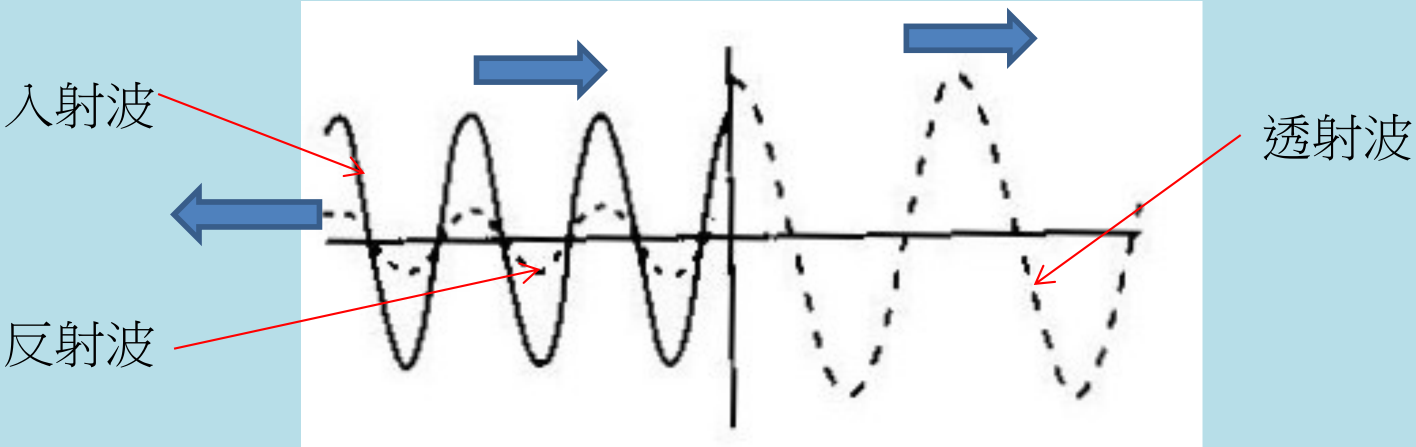
$$T = \frac{2k}{k+q}$$

$k>q, T>1$

R決定了反射波強度，T決定了透射波強度。







我們得到的定態解，乘上時間演化就是完整的波函數：

$$\Psi_k(x,t) = e^{i\left(kx-\frac{E}{\hbar}t\right)} + Re^{-i\left(kx+\frac{E}{\hbar}t\right)} \qquad x < 0$$

$$= Te^{i\left(qx-\frac{E}{\hbar}t\right)} \qquad x > 0$$

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

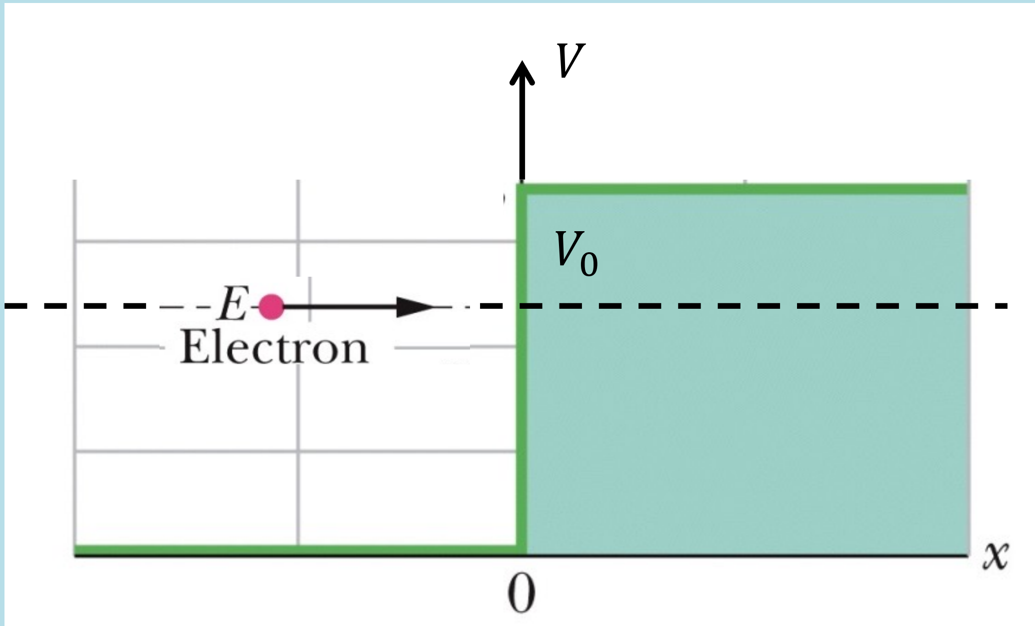
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

入射波的相位$kx-\frac{E}{\hbar}t$會向右傳播，透射波也向右，反射波相位$kx+\frac{E}{\hbar}t$向左傳播。

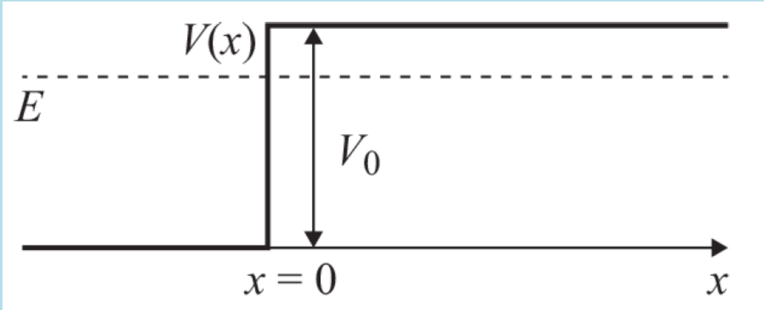
階梯狀位能全反射

$$V = 0, \qquad x < 0$$
$$V = V_0, \qquad x > 0$$

如果 $E < V_0$



$x < 0$ $\quad \psi_E = e^{ikx} + Re^{-ikx}$ $\quad k \equiv \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$



$x > 0$ $\quad E < V_0$ 古典粒子不能存在這樣的區域

但與時間無關的薛丁格方程式依舊有解：

$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \kappa^2\psi_E \;\;), - E]\psi_E \equiv \kappa^2\psi_E \qquad \kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

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

在量子力學中，波函數還是有解，只是不再是正弦波，而是指數函數。

波函數若向右隨x增加，則在無限遠處波函數發散，不可能，因此$D = 0$。

$\psi_E = Te^{-\kappa x}$ 進入折返點內禁止區後，振幅會指數遞減！

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

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

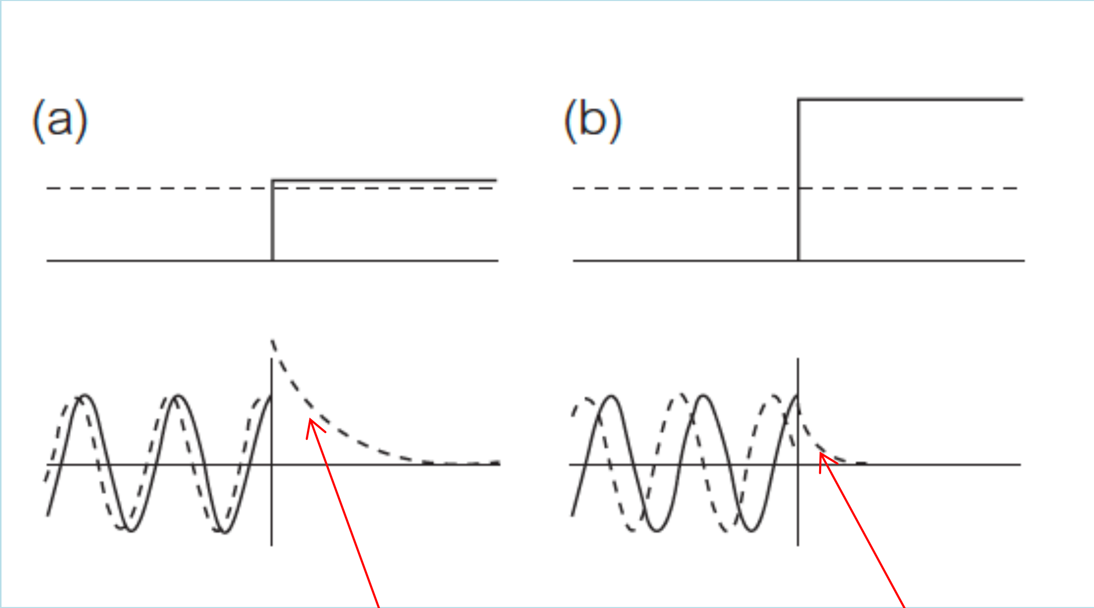
同樣要求ψ及ψ'在邊界原點連續，

$$1 + R = T \qquad k - kR = i\kappa T$$

與之前式子相同，只要以$i\kappa$替代q即可！

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

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



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

在禁止區，機率密度不再是常數，而是隨滲透距離x指數遞減了！

滲透距離大約是 $\dfrac{1}{\kappa} = \hbar \dfrac{1}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ $\sim\hbar$，一般來說是微觀的距離。

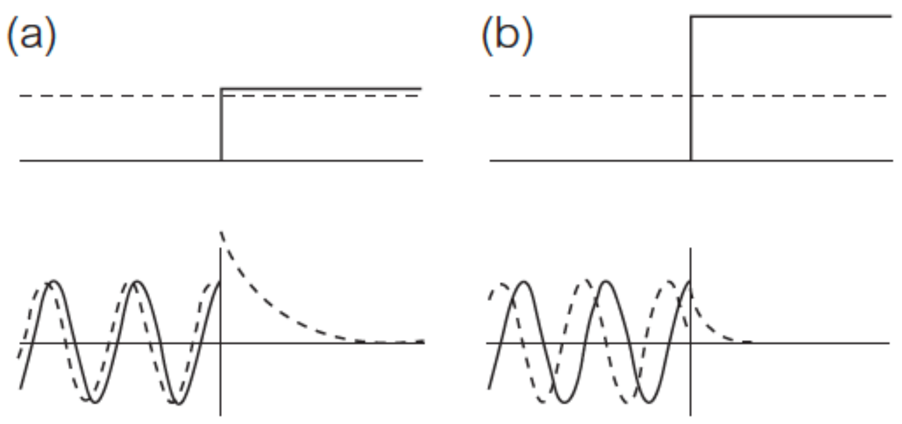


Figure 11.4. Same as for Fig. 11.3, but for two cases where $V_0 > E > 0$.

$$k - i\kappa \equiv |k - i\kappa| e^{-i\delta} = \sqrt{k^2 + \kappa^2} e^{-i\delta}$$

$$k + i\kappa = |k + i\kappa| e^{i\delta} = \sqrt{k^2 + \kappa^2} e^{i\delta}$$

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

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

反射波與入射波振幅相同，但相差一個相角2δ！δ由E決定。

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

$$|R|^2 = \left| e^{-2i\delta} \right|^2 = 1$$

反射率為1，完全反射。透射率是零。

在禁止區，雖然有滲透機率，可算出機率流為零，並沒有機率流進去！

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

對實數的ψ，兩項抵消，$j = 0$。

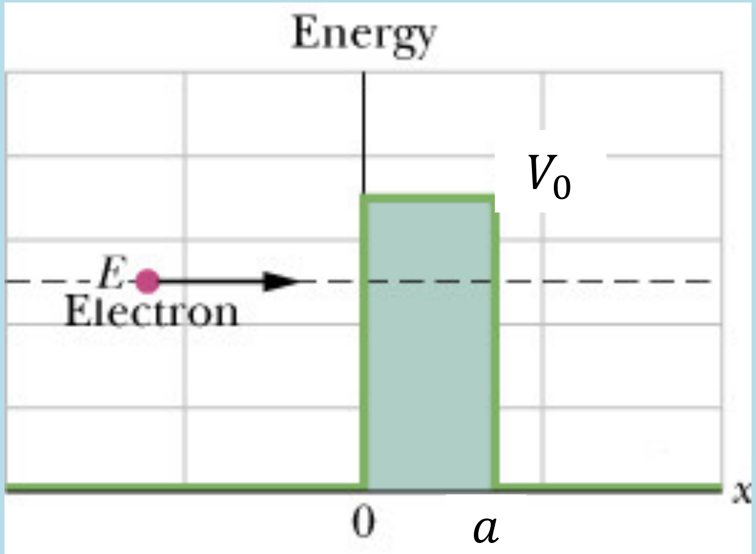
穿隧效應 Tunneling Effect

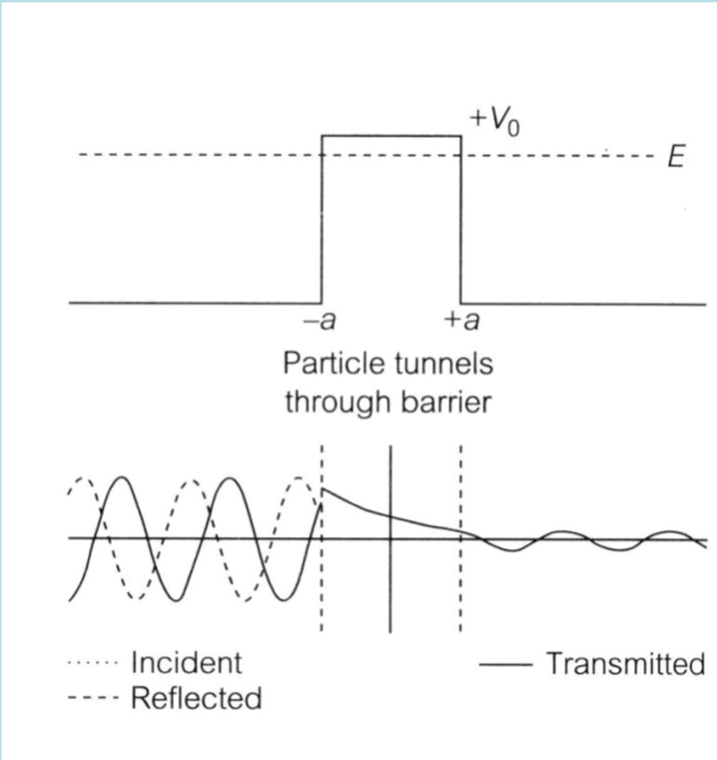
在禁止區，雖然有滲透機率，可算出機率流為零，並沒有機率流過去！

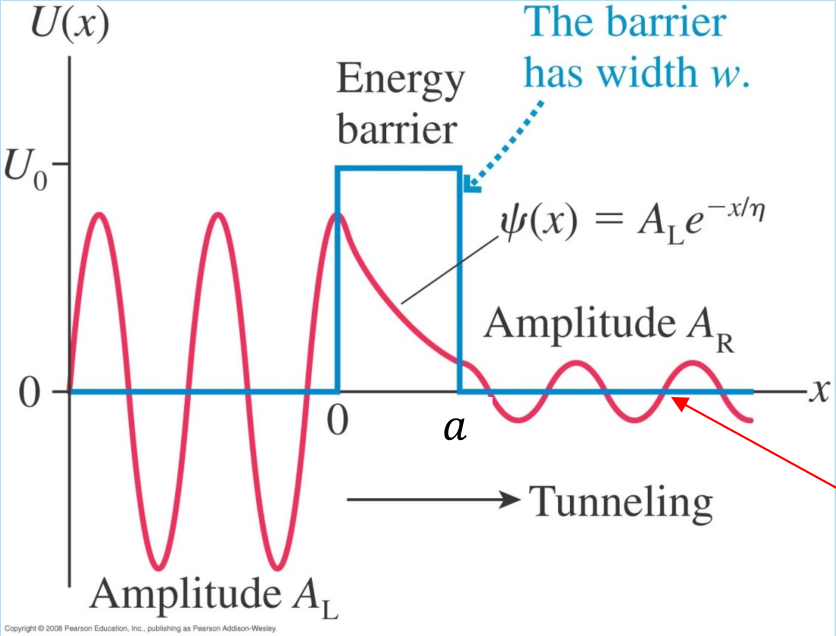
滲透距離大約是 $\boxed{\dfrac{1}{\kappa} = \hbar \dfrac{1}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}}$ $\sim\hbar$，一般來說是微觀的距離。

但如果這位能也是微觀，寬度很薄，粒子便能滲透過去，

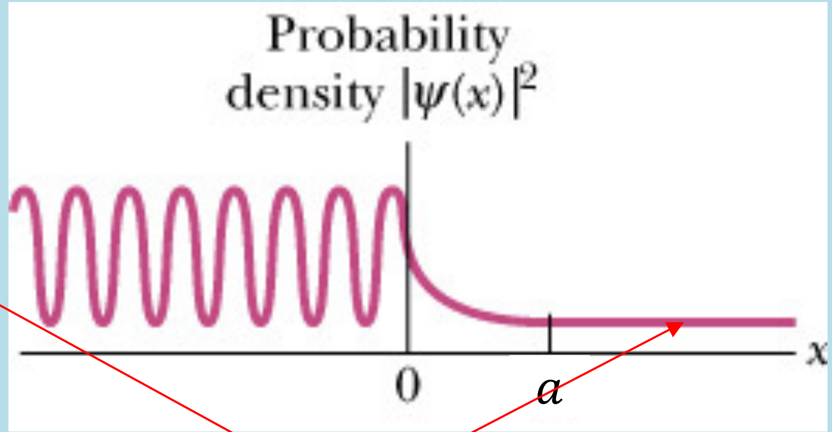
在位能壘後方形成一個自由粒子波！







Tunneling effect 穿隧效應



在位壘中 $\psi_E(x) \sim Ae^{-\kappa x}$ 機率密度 $P = |\psi_E|^2 = |A|^2 e^{-2\kappa x}$

隨距離而指數遞減。在$x = a$，ψ_E要連續。 $\psi_E(x) \sim e^{-\kappa a} \cdot e^{ik(x-a)}, x > a$

穿透後$x > a$機率 $\propto e^{-2\kappa a}$

一個電子有以上的機率會穿透，其餘的機率則是反彈！ $\kappa a = a\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$

穿隧效應是一個結果不確定的機率現象。若寬度a很小：

$$a \sim \frac{1}{\kappa} = \hbar \frac{1}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

就有可測的機率穿透！

能量差距越小，κ越小，穿透率越大！

EXAMPLE 40.7 TUNNELING THROUGH A BARRIER

SOLUTION

A 2.0-eV electron encounters a barrier 5.0 eV high. What is the probability that it will tunnel through the barrier if the barrier width is (a) 1.00 nm and (b) 0.50 nm?

SOLUTION

IDENTIFY and SET UP: This problem uses the ideas of tunneling through a rectangular barrier, as in Figs. 40.19 and 40.20. Our target variable is the tunneling probability T in Eq. (40.42), which we evaluate for the given values $E = 2.0\text{ eV}$ (electron energy), $U = 5.0\text{ eV}$ (barrier height), $m = 9.11 \times 10^{-31}\text{ kg}$ (mass of the electron), and $L = 1.00\text{ nm}$ or 0.50 nm (barrier width).

EXECUTE: First we evaluate G and κ in Eq. (40.42), using $E = 2.0\text{ eV}$:

$$G = 16\left(\frac{2.0\text{ eV}}{5.0\text{ eV}}\right)\left(1 - \frac{2.0\text{ eV}}{5.0\text{ eV}}\right) = 3.8$$

$$U_0 - E = 5.0\text{ eV} - 2.0\text{ eV} = 3.0\text{ eV} = 4.8 \times 10^{-19}\text{ J}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2(9.11 \times 10^{-31}\text{ kg})(4.8 \times 10^{-19}\text{ J})}}{1.055 \times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}} = 8.9 \times 10^{9}\text{ m}^{-1}$$

(a) When $L = 1.00\text{ nm} = 1.00 \times 10^{-9}\text{ m}$, we have $2\kappa L = 2(8.9 \times 10^{9}\text{ m}^{-1})(1.00 \times 10^{-9}\text{ m}) = 17.8$ and $T = Ge^{-2\kappa L} = 3.8e^{-17.8} = \boxed{7.1 \times 10^{-8}}$.

(b) When $L = 0.50\text{ nm}$, one-half of 1.00 nm, $2\kappa L$ is one-half of 17.8, or 8.9. Hence $T = 3.8e^{-8.9} = \boxed{5.2 \times 10^{-4}}$.

EVALUATE: Halving the width of this barrier increases the tunneling probability T by a factor of $(5.2 \times 10^{-4})/(7.1 \times 10^{-8}) = 7.3 \times 10^{3}$, or nearly ten thousand. The tunneling probability is an *extremely* sensitive function of the barrier width.

因為是穿透率指數遞減，因此對位壘厚度非常敏感。

厚度相差一倍，穿透率竟相差一萬倍！

穿隧效應的應用

Scanning Tunneling Microscope　穿隧顯微鏡 STM

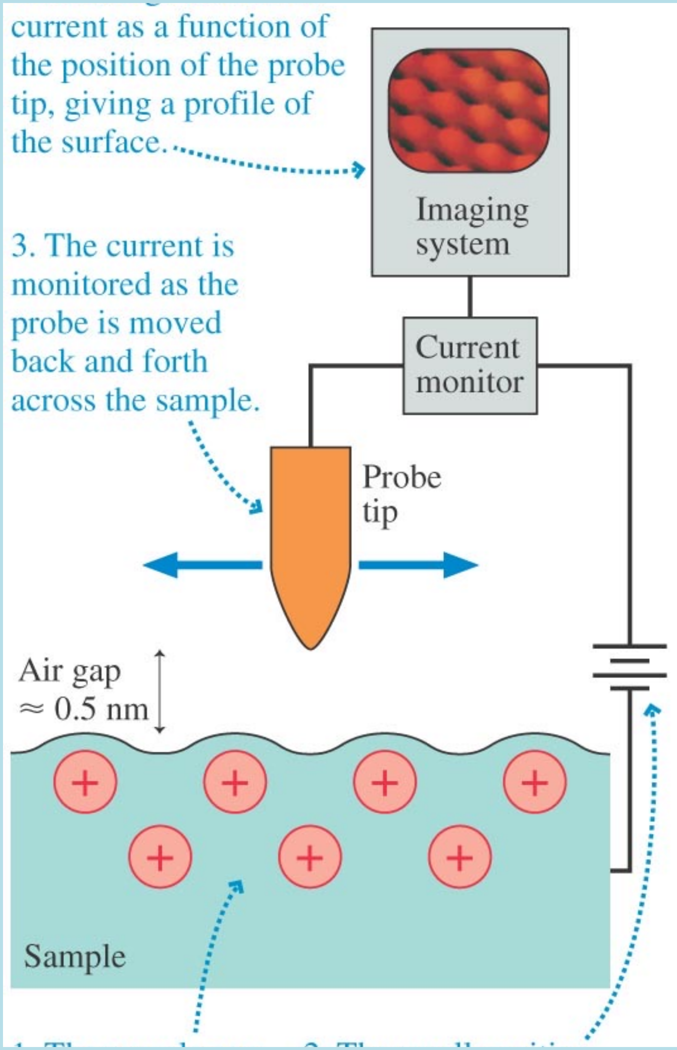
穿透機率 $\propto e^{-2\kappa a}$

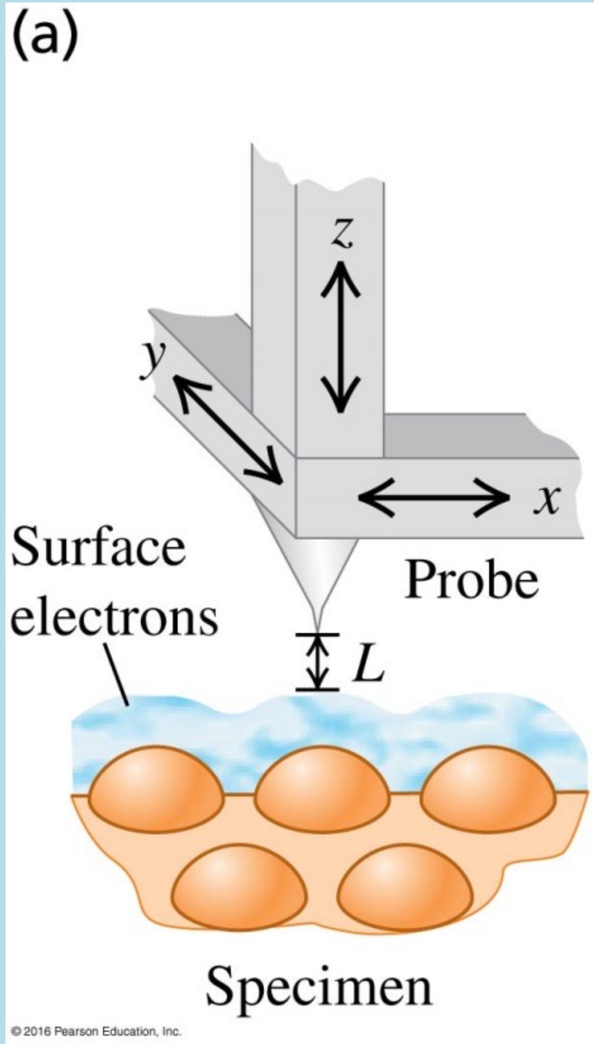
若是電子流，則

穿透機率正比於穿透電流。

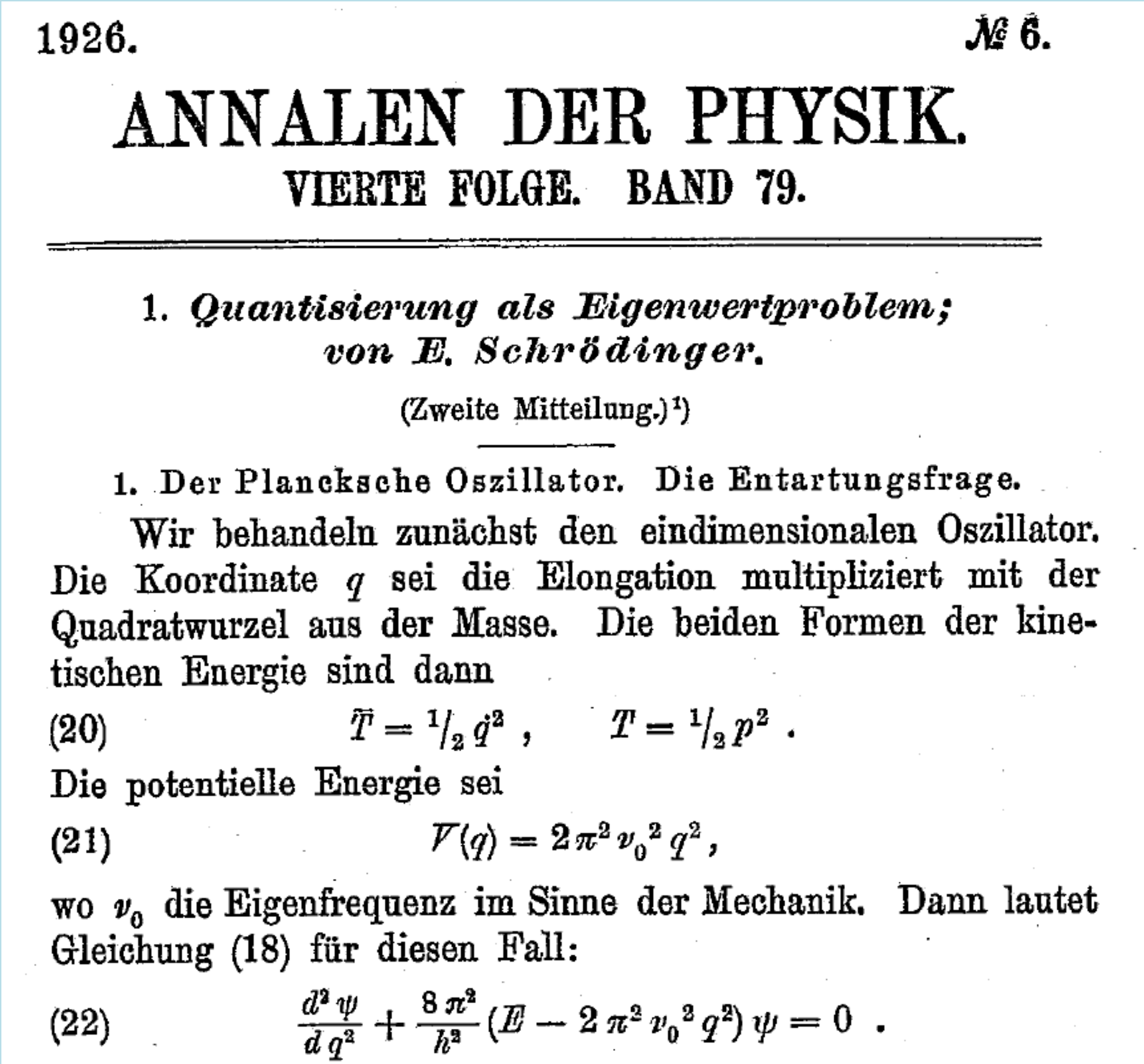
保持穿透電流為定值，

探針與表面距離a就是定值。





We can do better! Solving the Euqation!



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) $$\bar{T} = {}^1/_2\, \dot{q}^2\,, \qquad T = {}^1/_2\, p^2\,.$$

Die potentielle Energie sei

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

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

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

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

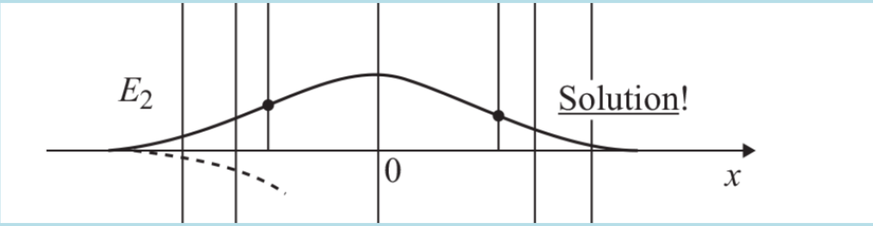
$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}kx^2 - E\right)\psi_E \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2u}{dx^2} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2u - \frac{2mE}{\hbar^2}u$$

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

讓我們先感覺一下這個函數$u(y)$的特性：

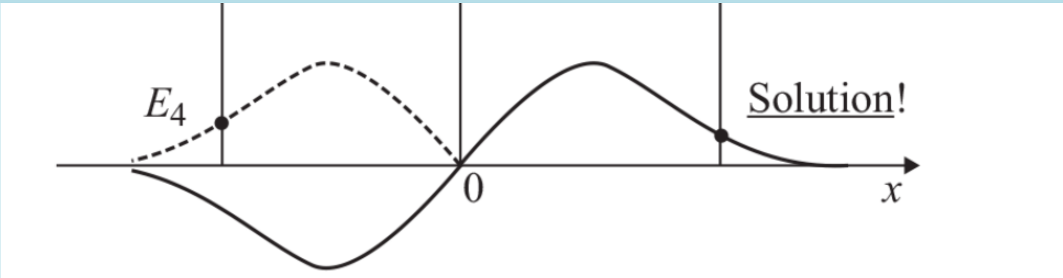
$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$$

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：



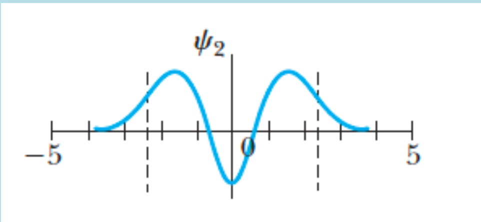
這是偶函數。

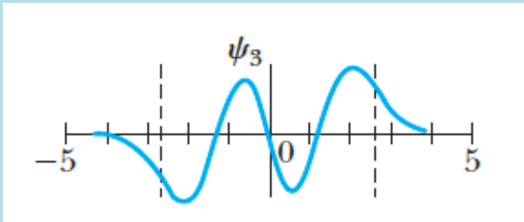
若(特別的多項式)是一次方x，此函數在遠處是高斯分佈：
在∞趨近指數遞減，在原點附近穿過x軸，在此函數需為零：



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：

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

代入後先看各項的最高次的貢獻：

$$n(n-1)a_ny^{n-2}-2na_ny^n+(\varepsilon-1)a_ny^n$$

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。

$$-2na_ny^n+(\varepsilon-1)a_ny^n=0$$

簡化後得到一個極漂亮的式子：

$$-2n+(\varepsilon-1)=0$$

n是多項式解的冪次，ε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！

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

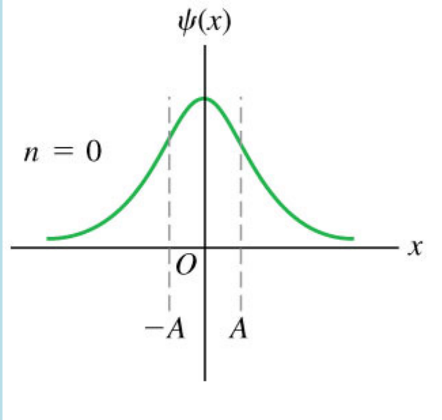
能量只有在這些值時，定態方程式才有解！

量子簡諧運動的能量是量子化的！

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

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

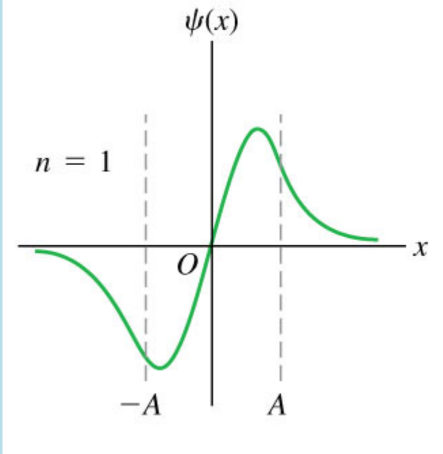
$$h_n(y) = \sum_{j=1}^{n} a_j y^j$$



前三個定態！

$n = 0$

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



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

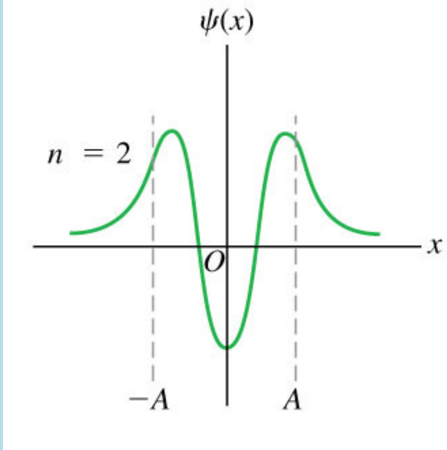
Ground state

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

常數則由歸一化條件給定：

$n = 1$ 1st excited state

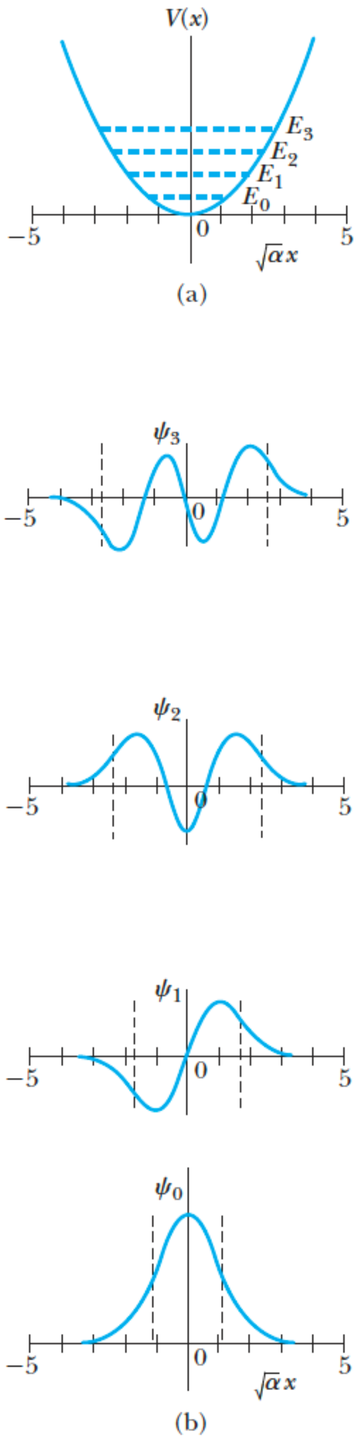
$$h_1(y) = a_1 y, \qquad u_1(y) = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}}$$



$n = 2$ 2nd excited state

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

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



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

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_a可以寫成態函數與本徵函數的空間積分:

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

$|c_n|^2$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！