

INTRODUCTION TO
QUANTUM
MECHANICS

THIRD EDITION



DAVID J. GRIFFITHS
DARRELL F. SCHROETER

當電子不是自由粒子，而是受到一個位能的影響！

此時動量與能量的關係要修改為：然後代入翻譯表：

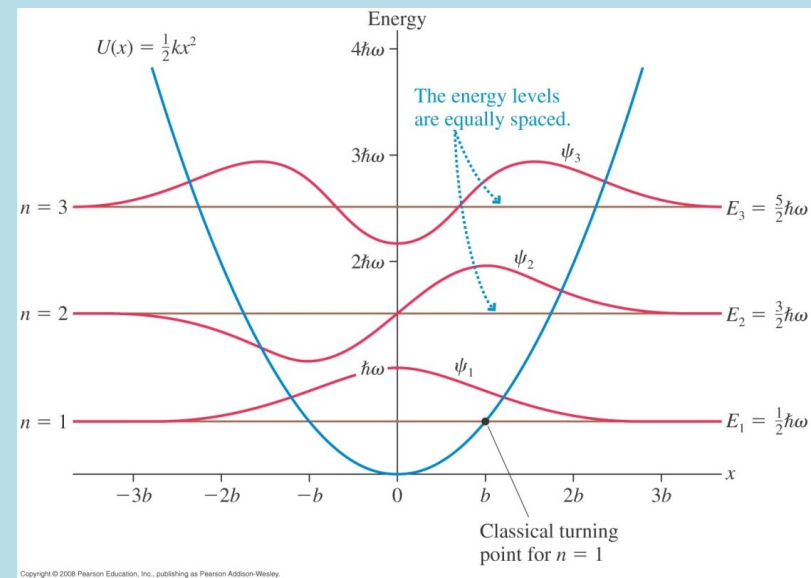
$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$



電子波波方程式

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \leftrightarrow p$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow E$$

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



Schrodinger Wave Equation for the **complex wave function** $\Psi(x, t)$.

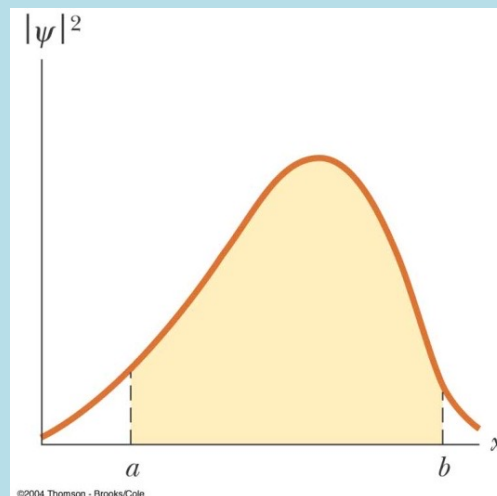
這個翻譯表比這裡所顯示的更真實！

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

位置的期望值即是以機率為權重對位置求和：

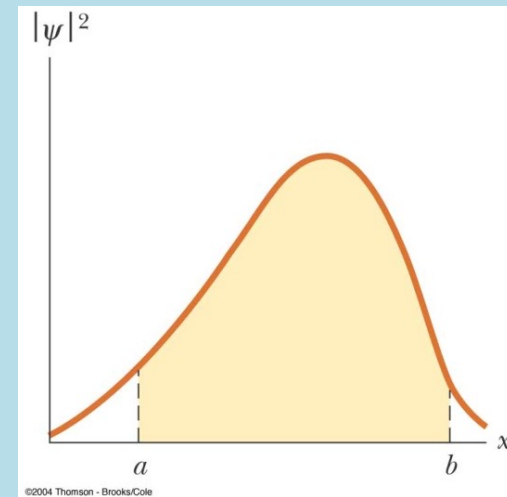
位置為連續變數，因此需做積分。

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



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。

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



這個表示式中的微分有點熟悉！

終極翻譯表，直接由粒子圖像翻譯為波函數的運算！

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \leftrightarrow p$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow E$$

這可能不是巧合！大膽猜想，動量期望值可以以類似的公式計算：

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

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

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，直接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：

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

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

大膽地假設，所有物理量本質上，都對應作用於波函數的運算算子！

該物理量測量的期望值，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！

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

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

尋找定態Stationary State波函數，時間部分與空間部分可以分離：

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

代入薛丁格方程式：

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

得到：

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

左右都除以 $\psi(x) \cdot \phi(t)$ ：

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

現在左邊只與 x 有關，右邊只與 t 有關，兩者是獨立變數！

這不可能，唯一例外是左右兩式與兩者都無關，是一常數。設為 E 。

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

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

時間部分是非常一般的一次微分方程式：

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



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

如同古典的可分解波，定態波函數時間部分可以被分離，且可被完全決定， $\phi(t)$ 是一個複數函數，不完全是古典的簡諧運動演化，但實數部的確就是古典的簡諧運動演化，故也可定義 $\frac{E}{\hbar}$ 為熟悉的角頻率 ω 。

$$E = \hbar\omega$$

常數 E 似乎就對應這個狀態的能量。將來會完整推導 E 的確就是測量上的能量。

定態波函數的時間演化就是：單純的乘上一個Phase factor： $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ 。

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

可以被分離的波函數，

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

$\psi(x)$ 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，因為它所有可測量的量都與時間無關。

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

有角頻率 ω ，但觀測竟然沒有時間變化！

其他物理測量的期望值也都與時間無關！

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



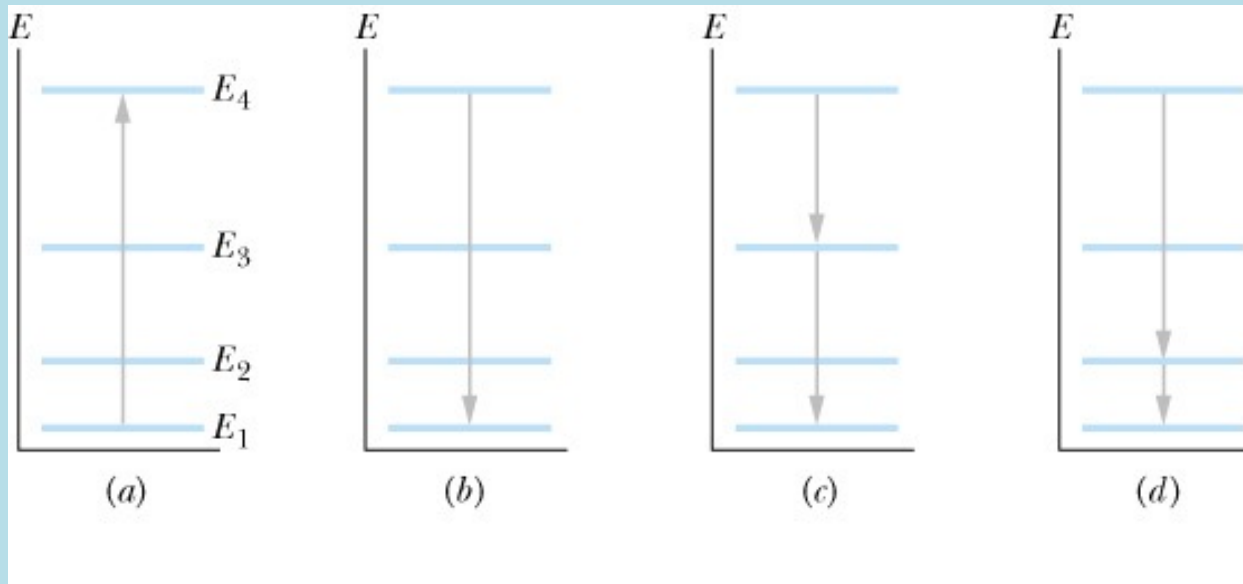


在定態中，所有對電子的測量結果，都與時間無關！

牛頓力學中，唯一的定態，就是靜止狀態！

但量子力學中，卻有許多定態。

一個量子系統的定態決定了此系統的物理性質。



一系列的定態給出系統的能階！

電子可以在能階定態之間以放出與吸收光子的方式躍遷，形成光譜。

$$hf = \Delta E$$

而到達基態後，電子是穩定的。

時間部分已單純的解出，定態解就由空間位置部分 $\psi(x)$ 滿足的方程式決定：

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

位置函數 $\psi(x)$ 對應特定的 E ，因此有時會將 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

與時間無關薛丁格方程式的解就是定態，

首先試一下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。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E}{dx^2} + V_0\psi_E = E\psi_E$$

假設

$$E > V_0$$

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

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

$$a^2 = -k^2$$

$$a = \pm ik$$

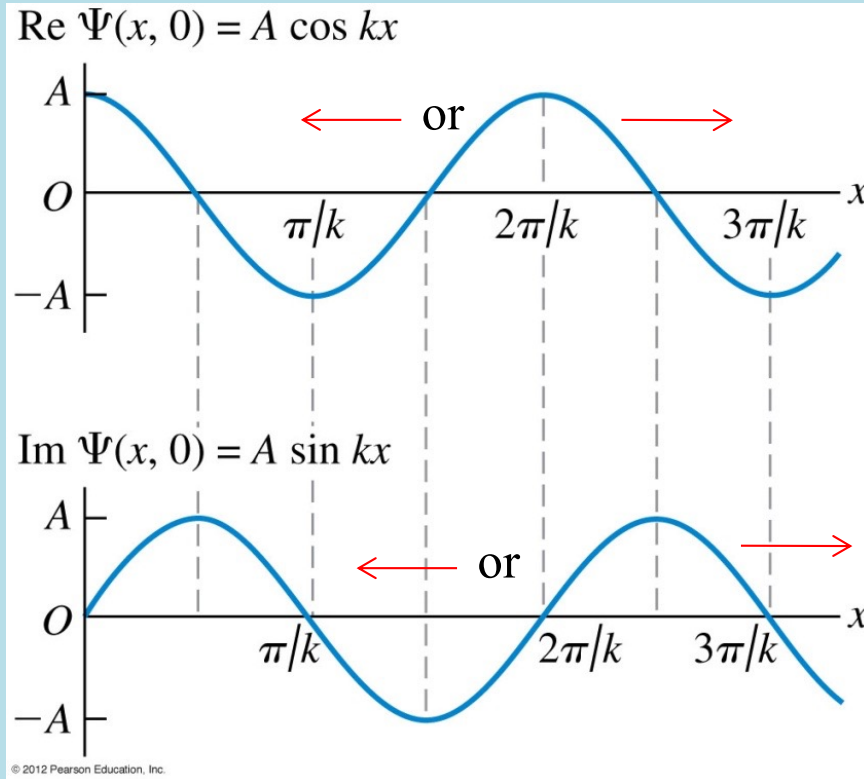
a 有兩個解！

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

自由空間的電子定態的完整波函數

$$\Psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) \cdot e^{-i\omega t}$$

$$= Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)} \sim Ae^{ik(x-vt)} + Be^{-ik(x+vt)}$$



這其實就是古典d'Alembert solution

$$\phi(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt)$$

只是現在色散關係不同，

波速 $v = \frac{\omega}{k}$ 不再是常數。

實數部與虛數部有一個相同的波長 λ ：

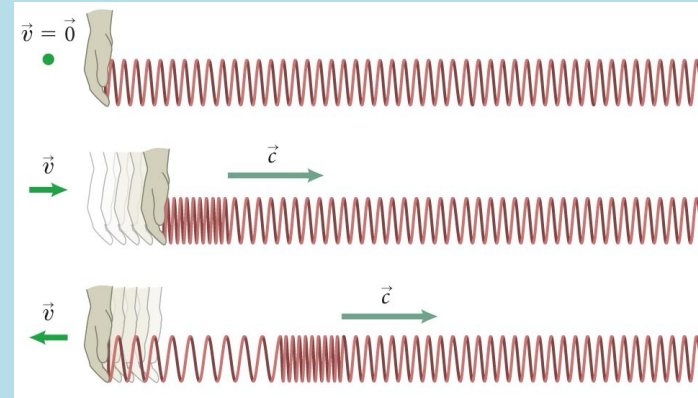
$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{p}$$

這是可以透過干涉或繞射實驗觀察到的量。

但請注意：自由電子波函數雖然有相位的傳播，測量卻與時間無關，是定態！

連續介質的波方程式 Wave Equation

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$



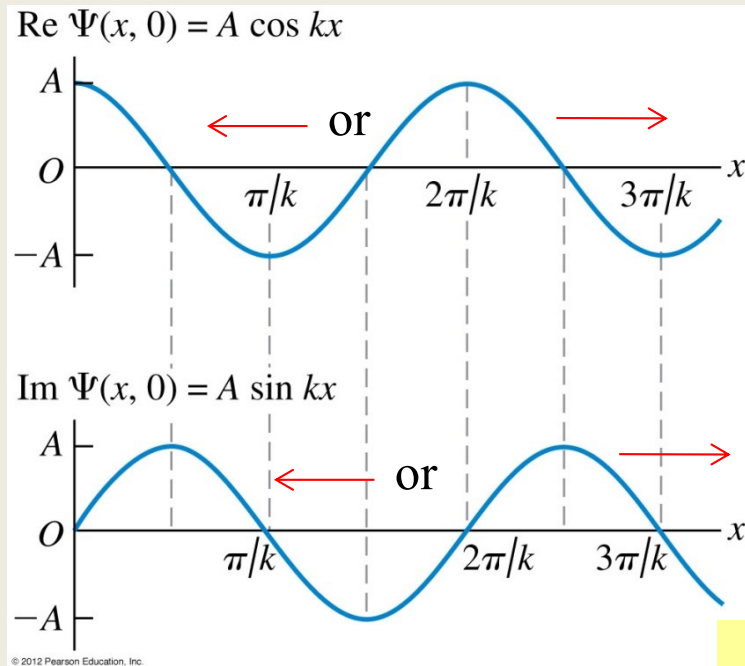
Initial Condition: 起始的弦位移 $\phi(x, 0)$ ，起始的弦垂直方向速度 $\frac{\partial \phi}{\partial t}(x, 0)$ 。

是不是要考慮邊界差別很大！

若不需考慮邊界、離開邊界很遠，介質中會有行進波的傳播 d'Alembert solution：

$$\phi(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt)$$





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：

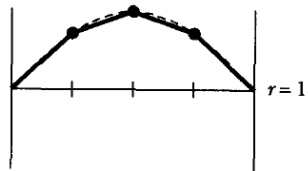
$$\Psi(x, t) = \psi_E(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = Ae^{i\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}x - \frac{E}{\hbar}t\right]} + Be^{-i\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}x + \frac{E}{\hbar}t\right]}$$

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。

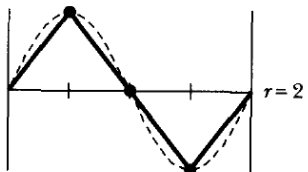


若介質大小有限，連續介質就如大數目的彈簧組，有一系列模式振動。

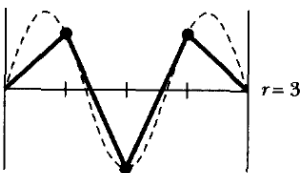
彈簧組運動：一個本徵向量就對應一個可獨立振盪的模式。



$$\mathbf{a}^{(1)} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$



$$\mathbf{a}^{(2)} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$



$$\mathbf{a}^{(3)} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

我們先從兩個例子出發：

有邊界之自由電子，無限大的位能井

簡諧運動位能內之電子

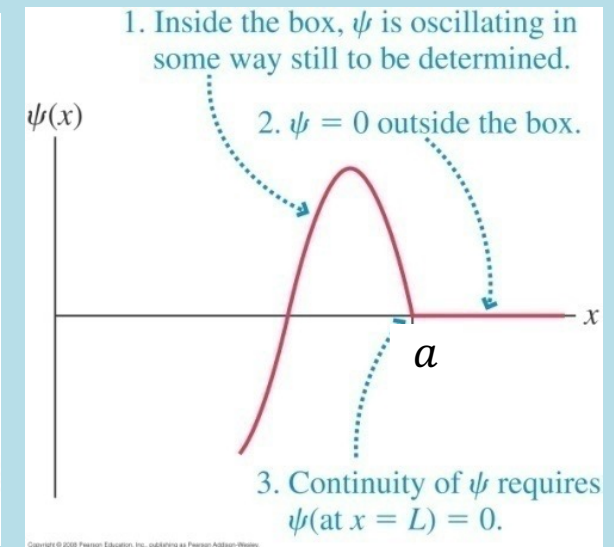
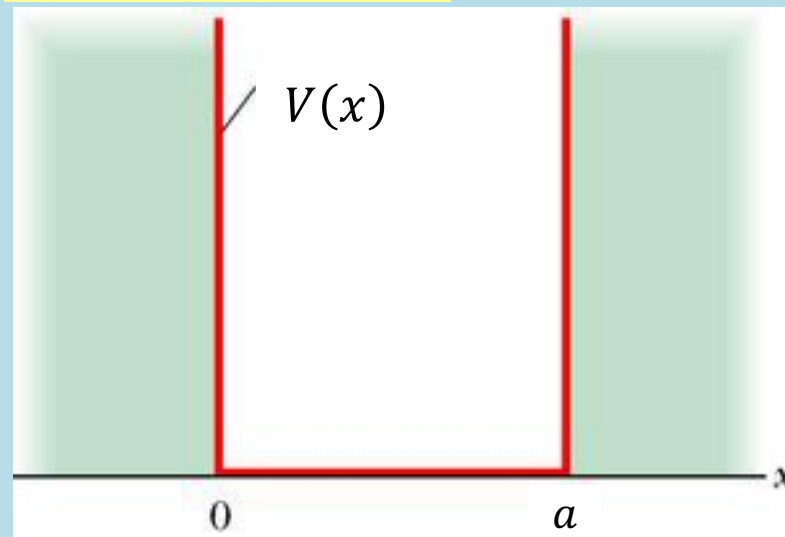
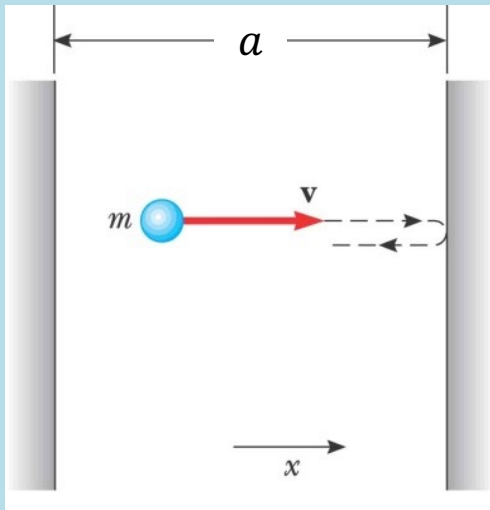
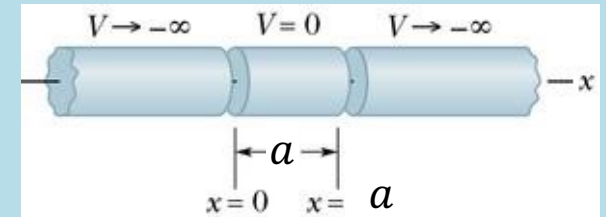
這是一個典型的束縛態。

無限位能井，盒子中自由電子的定態。

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

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

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



邊界外的位能是無限大，波函數必須為零，否則位能會是無限大！

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， $\Psi(0, t) = \Psi(a, t) = 0$

空間部分：

$$\psi_E(0) = 0$$

$$\psi_E(a) = 0$$

金屬中的傳導電子所感受的位能就類似位能井。

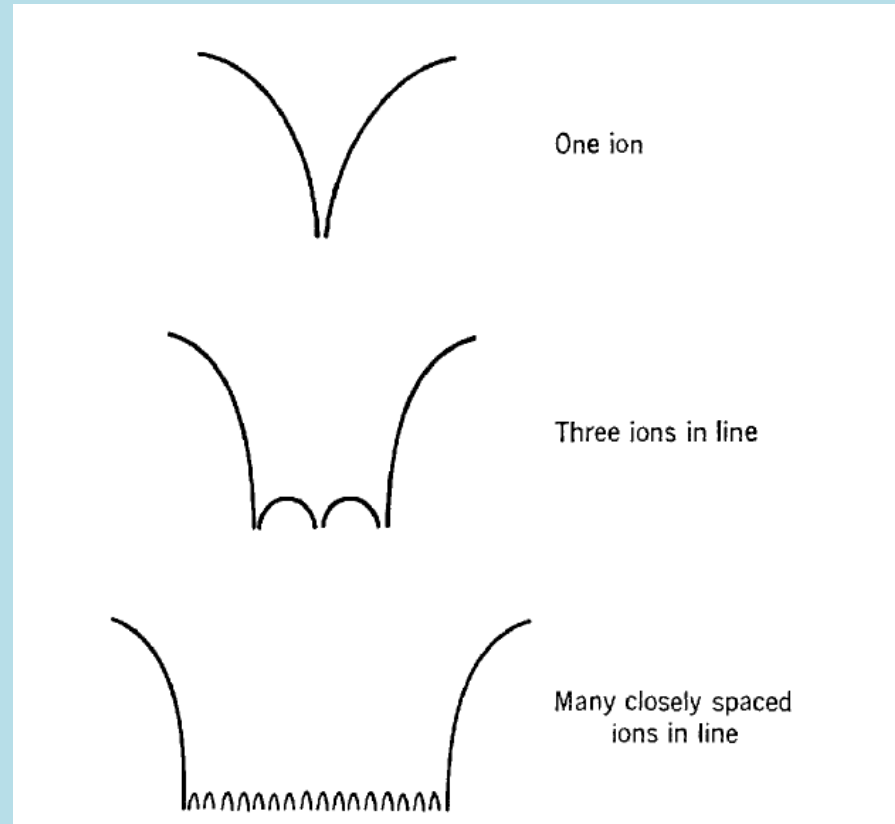
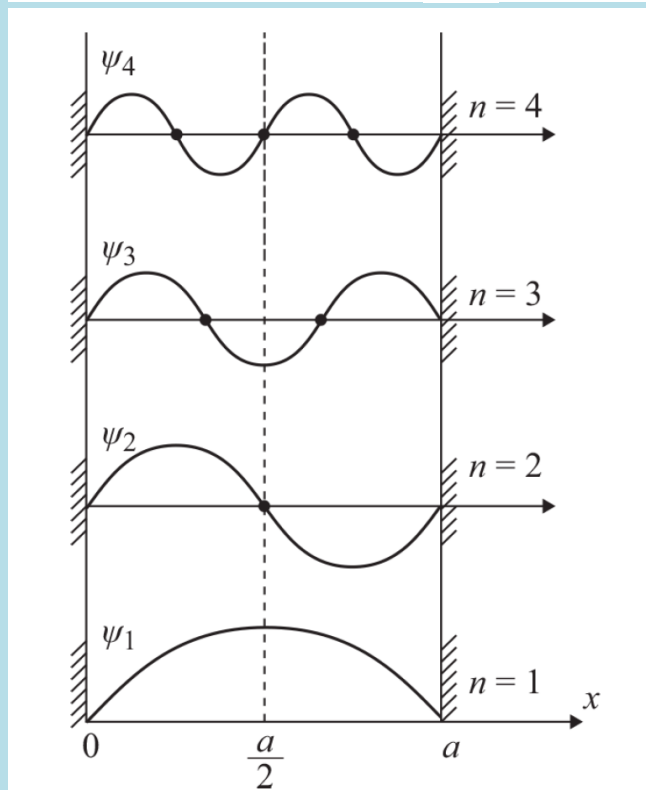
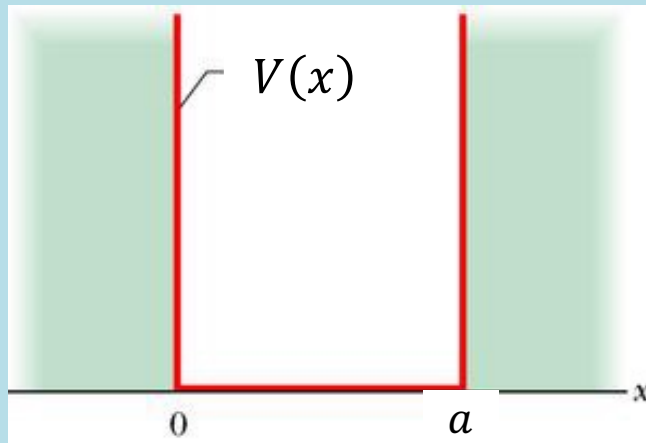


Figure 6-24 A qualitative indication of how an approximation to a square well potential results from superimposing the potentials acting on a conduction electron in a metal. The potentials are due to the closely spaced positive ions in the metal.

有邊界之自由電子



在邊界內，如同自由電子： $V(x) = 0$ 。

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \equiv -k^2\psi \quad \text{若 } E > 0 \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

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

邊界條件：

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(a) = 0$$

與弦駐波波函數空間部分 $X_i(x)$ 滿足一模一樣方程式，
一模一樣的邊界條件，其解自然也是一模一樣！

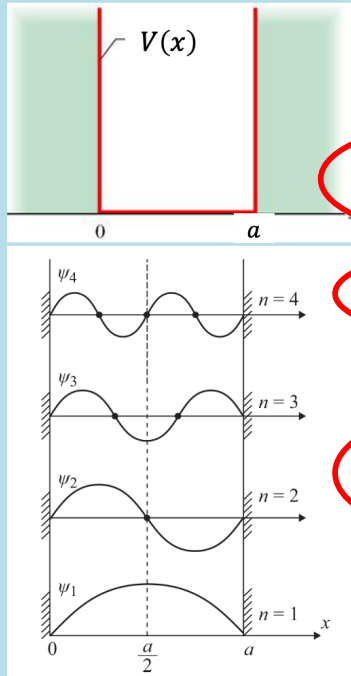
$$\psi_n = C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

注意只有在某些 $k = \frac{n\pi}{a}$ 才有解。

同理只有在對應的 E 才有解。

這是有限空間內薛丁格方程式定態的基本特徵。

有邊界之自由電子



在邊界內，如同自由電子： $V(x) = 0$ 。

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

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

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

邊界條件：

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

與弦駐波波函數的空間部分 $X_i(x)$ 滿足一模一樣方程式！

其解自然也是一模一樣！

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

注意只有在某些 $k = \frac{n\pi}{a}$ 才有解。

同理只有在對應的 E 才有解。

這是有限空間內薛丁格方程式定態的基本特徵。

$X(x)$ 滿足標準的二次常微分方程式：

$$\frac{d^2X}{dx^2} = \lambda X \quad \text{我們稱這是算子 } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \text{ 的本徵值方程式！}$$

它的解與 λ 是正或負有關：

$$X(x) = \begin{cases} Ae^{\sqrt{\lambda}x} + Be^{-\sqrt{\lambda}x} & \lambda > 0 \\ A' \cos \sqrt{-\lambda}x + B' \sin \sqrt{-\lambda}x & \lambda < 0 \\ A''x + B'' & \lambda = 0 \end{cases}$$

λ 若是正值， $X(x)$ 是指數函數， λ 若是負值， $X(x)$ 則是三角函數。

如果考慮邊界條件，只能選 $\lambda < 0, A' = 0$ 。一般會定義角波數： $k \equiv \sqrt{-\lambda}$

$$X(x) = \sin kx \quad \text{自動滿足原點邊界條件} \quad \phi(0, t) = 0$$

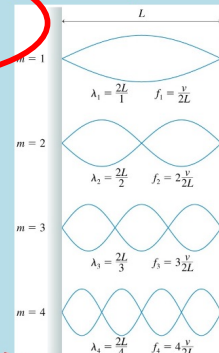
另一端邊界條件就對 k 、也就是 λ 有限制：

$$X(L, 0) \sim \sin(kL) = 0 \quad k_n = \frac{n\pi}{L} = \sqrt{-\lambda_n}$$

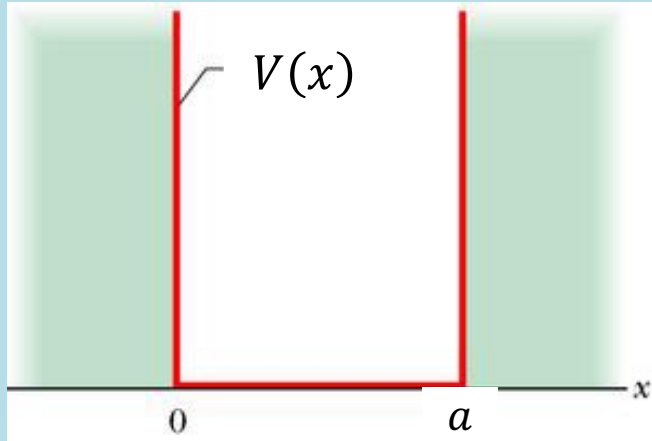
$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n = 1, 2, \dots \infty \quad \frac{d^2X_n}{dx^2} = \lambda_n X_n$$

我們稱這些解是算子 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 的本徵函數 Eigenfunction！

物理上對應一系列模式(駐波)，離散、可以 n 標定，但有無限多個。



有邊界之自由電子



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

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

但必須加上邊界條件：

$$\psi(0) = 0$$

$$A + B = 0$$

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

$$\psi = C \sin kx$$

重新定義常數： $C \equiv 2iA$

$$\psi(a) = 0$$

$$\psi(a) = C \sin ka = 0$$

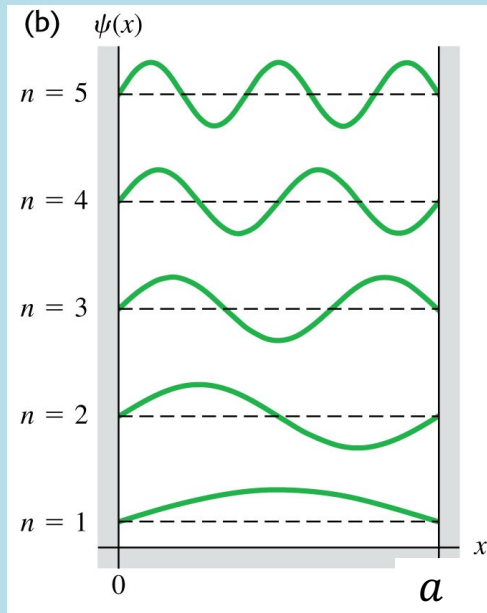
$$ka = n\pi$$

n 是自然數。

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

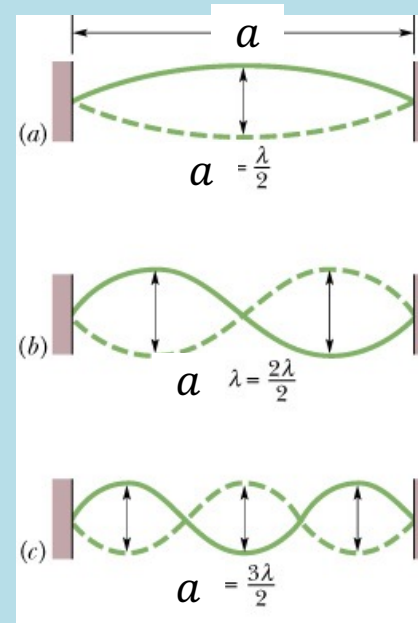
$$k = \frac{n\pi}{a}$$

ψ_n 與弦波駐波的波函數的空間部分 $X(x)$ 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 ：

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

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！

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



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

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。

ψ_n 與弦波駐波的波函數的空間部分一模一樣！

Solving Wave Equation: $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ and Schrodiner Wave Equation

8.2 THE METHOD OF SEPARATION OF VARIABLES

Since the additional conditions imposed on $u(x, t)$ in our string problem fall into two groups, (a) those involving x (boundary conditions) and (b) those involving t (initial conditions), it may be reasonable to seek solutions of the PDE in the form

因為起始條件與邊界條件是分開的，

首先尋找時間部分與空間部分，可以分離為 x, t 兩變數個別的函數的**模式解**：

$$\phi(x, t) = X(x) \cdot T(t)$$

一系列這樣的解的線性組合就構成所有可能的一般解。

作法：將起始條件分解為 $X(x)$ 的線性組合(永遠可以)。

$X(x)$ 各自作時間演化 $T(t)$ (簡諧振盪)後，最後再組合！

首先尋找時間部分與空間部分，可以分離為 x, t 兩變數個別的函數的**模式解**：

$$\phi(x, t) = X(x) \cdot T(t)$$

代入波方程式：

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

得到：

$$X \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = T v^2 \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}$$

一般會把 v^2 移到左邊，同時左右邊都除以 $X(x) \cdot T(t)$ 。偏微分可以寫成常微分：

$$\frac{1}{v^2} \frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2}$$

現在左邊只與 x 有關，右邊只與 t 有關，但兩者是獨立變數！相等並不可能。

唯一的例外：左右兩式都與各自的變數無關，是一常數。設此常數為 λ 。

$$\frac{1}{v^2} \frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} \equiv \lambda \quad \rightarrow \quad \frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda \cdot X \quad \frac{d^2 T}{dt^2} = v^2 \lambda \cdot T$$

我們就得到空間部分 X 與時間部分 T 各自需要滿足的常微分方程式。

將偏微分方程式分解Reduce為常微分方程式，這是常見的作法。

時間部分 T 很快可以解出：

$$\frac{1}{v^2} \frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \lambda$$

$$\frac{d^2 T}{dt^2} = v^2 \lambda T \equiv -\omega^2 T$$

若 $\lambda < 0$ ，那麼 $T(t)$ 就是以 $\omega = v\sqrt{-\lambda}$ 為角頻率的簡諧運動！

$$T(t) = a_m \cos(\omega t + \phi) \sim f \cos(\omega t) + g \sin(\omega t)$$

因此這樣的可分解的解，從時間演化看，也可以稱為模式振盪解。

$X(x)$ 滿足標準的二次常微分方程式：

$$\frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda X \quad \text{我們稱這是算子 } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \text{ 的本徵值方程式！}$$

它的解與 λ 是正或負有關：

$$X(x) = \begin{cases} Ae^{\sqrt{\lambda}x} + Be^{-\sqrt{\lambda}x} & \lambda > 0 \\ A' \cos \sqrt{-\lambda}x + B' \sin \sqrt{-\lambda}x & \lambda < 0 \end{cases}$$

λ 若是正值， $X(x)$ 是指數函數， λ 若是負值， $X(x)$ 則是三角函數。

如果考慮邊界條件，只能選 $\lambda < 0, A' = 0$ 。一般會定義角波數：

$$k \equiv \sqrt{-\lambda}$$

$$X(x) = \sin kx \quad \text{自動滿足原點邊界條件} \quad \phi(0, t) = 0$$

另一端邊界條件就對 k 、也就是 λ 有限制：

$$X(L, 0) \sim \sin(kL) = 0$$

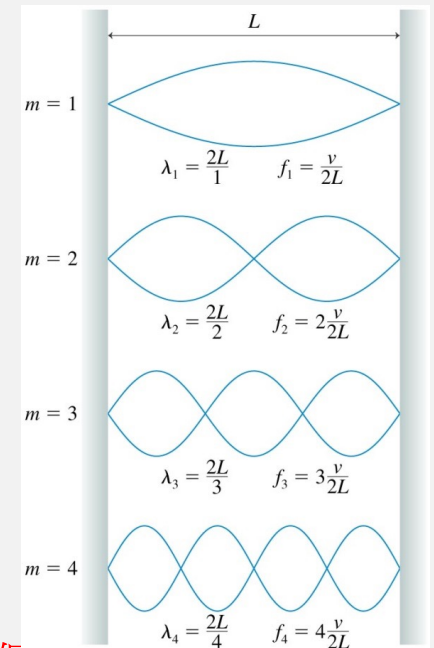
$$k_n = \frac{n\pi}{L} = \sqrt{-\lambda_n}$$

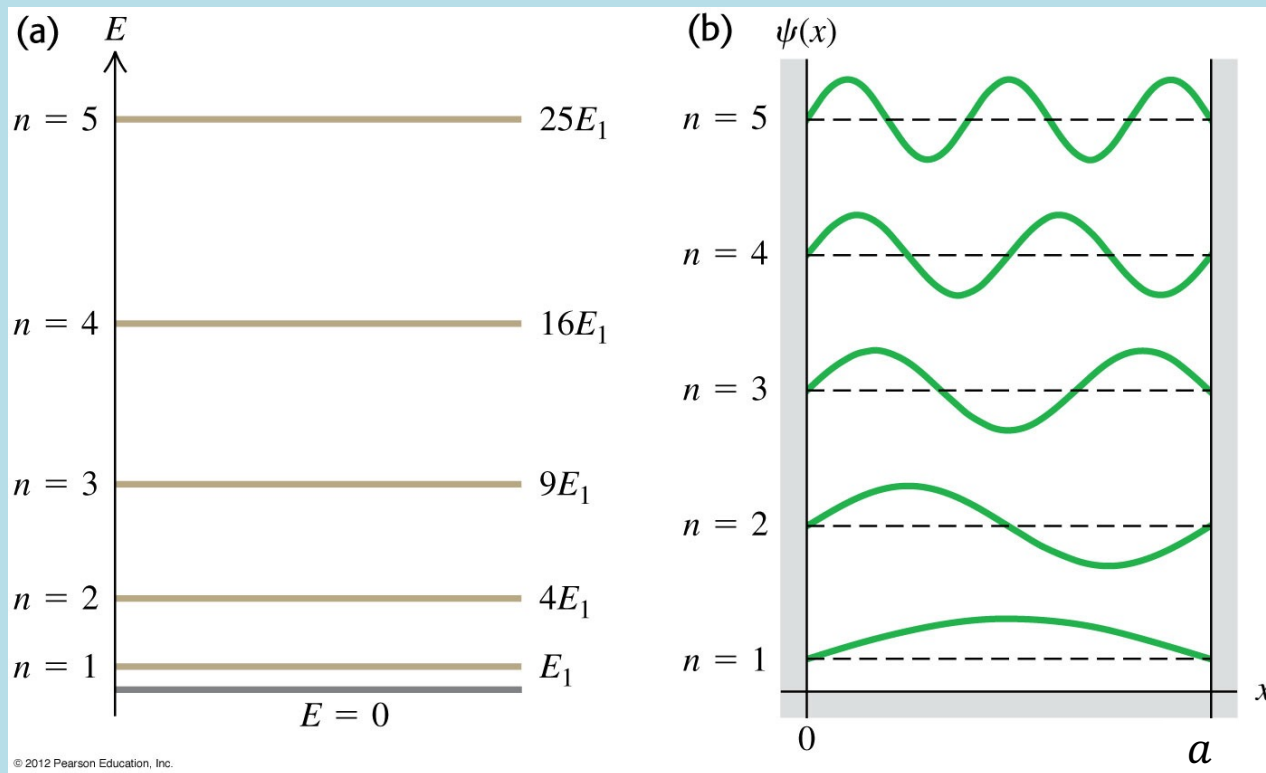
$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$\frac{d^2 X_n}{dx^2} = \lambda_n X_n$$

我們稱這些解是算子 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 的本徵函數 **Eigenfunction** ！

物理上對應一系列模式(駐波)，**離散**、可以 n 標定，但有無限多個。





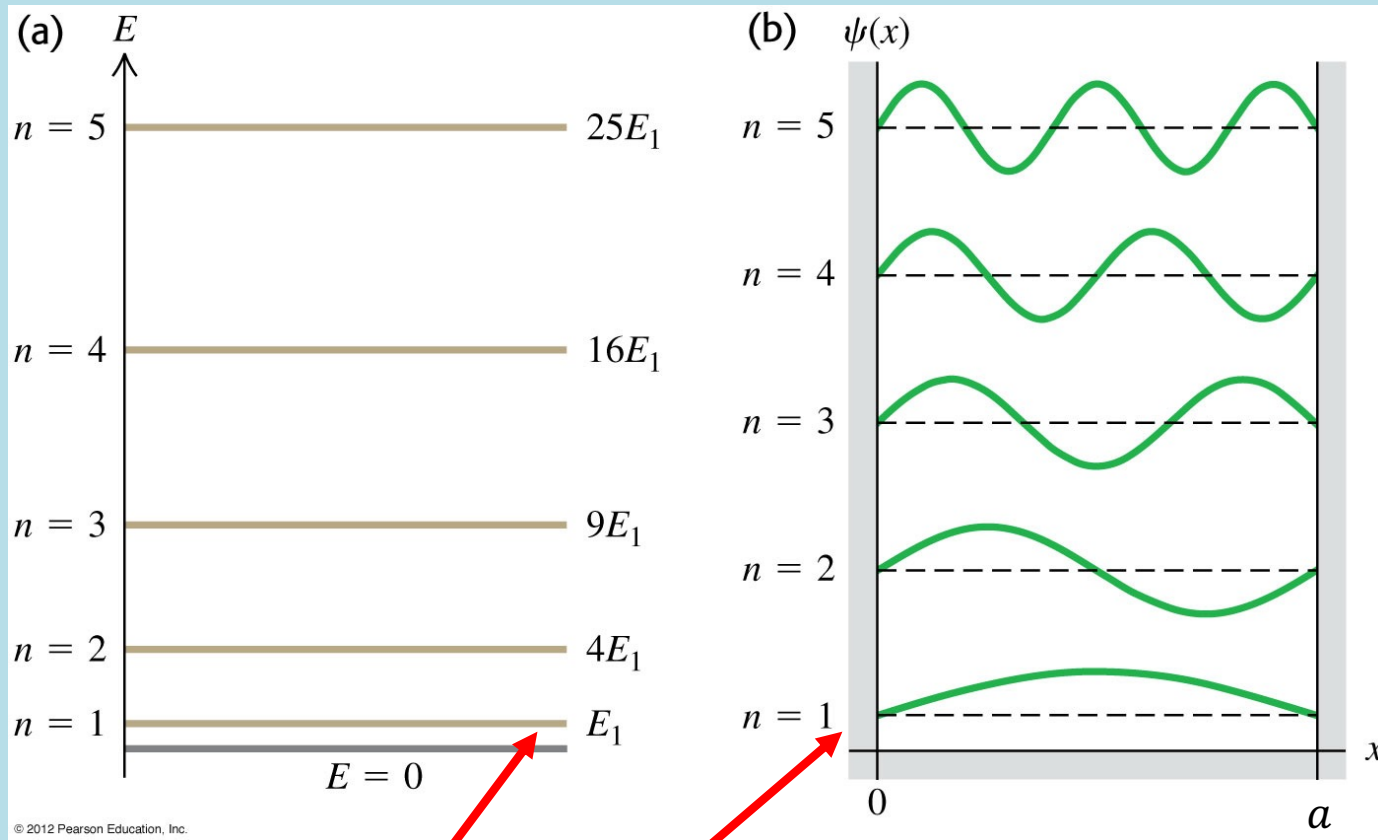
注意只有在 $k = \frac{n\pi}{a}$ 才有解，因此只有在對應的 E 才有解。

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a}$$

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

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！

這些定態的能量是量子化。未來可以證明對任意解，能量測量值也只會是 E_n 。



© 2012 Pearson Education, Inc.

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

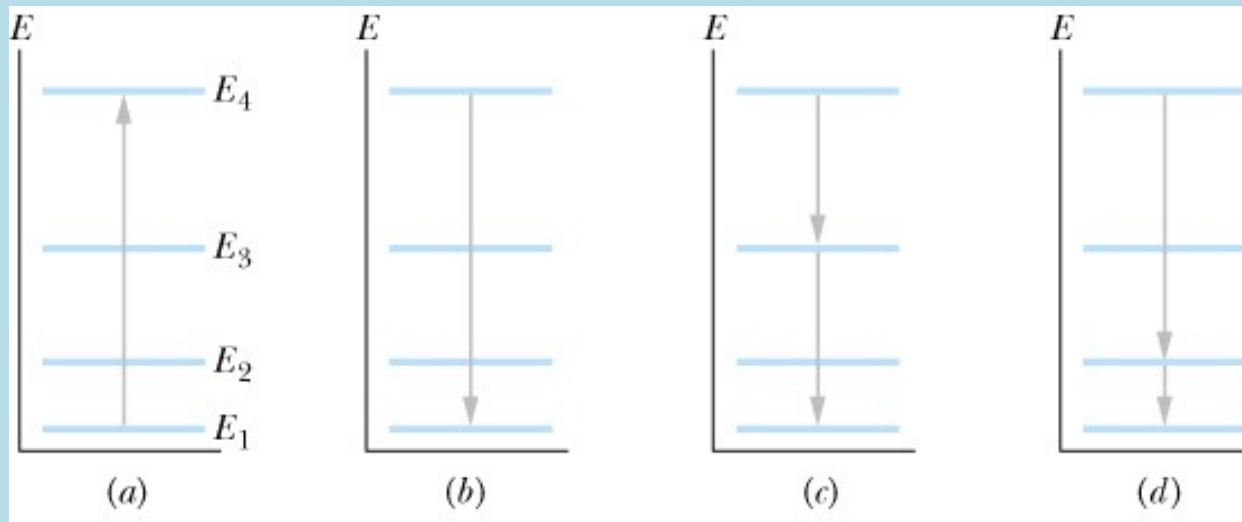
有一能量最低的基態，能量不為零！

注意基態的動量不為零。

電子是靜不下來的！

這是測不準原理的結果。





電子可以在能階定態之間以放出與吸收光子的方式躍遷。

$$hf = \Delta E$$

Consider an infinite box of unknown width. In transitions between neighboring values of n , photons of various energies are emitted. It is found that the largest wavelength of the various photons seen is $450 \times 10^{-9} \text{ m}$. Use this information to determine a , the width of the infinite box.

到達基態後，電子是穩定的。

基態的存在是量子力學重要的特徵！

總機率必須等於 1

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

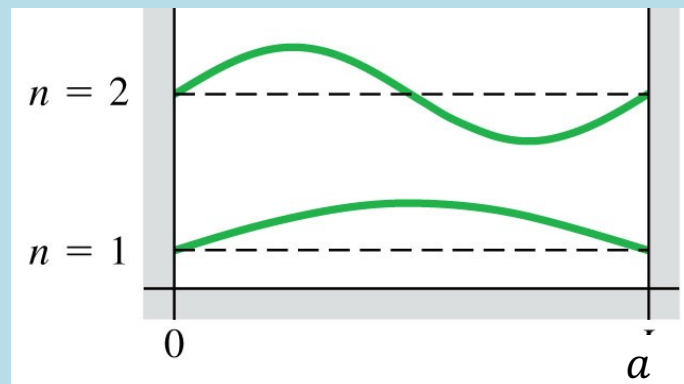
由歸一化條件可以解出係數 C

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

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

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

只有 C 的絕對值對物理有影響。所以常就直接取實數。

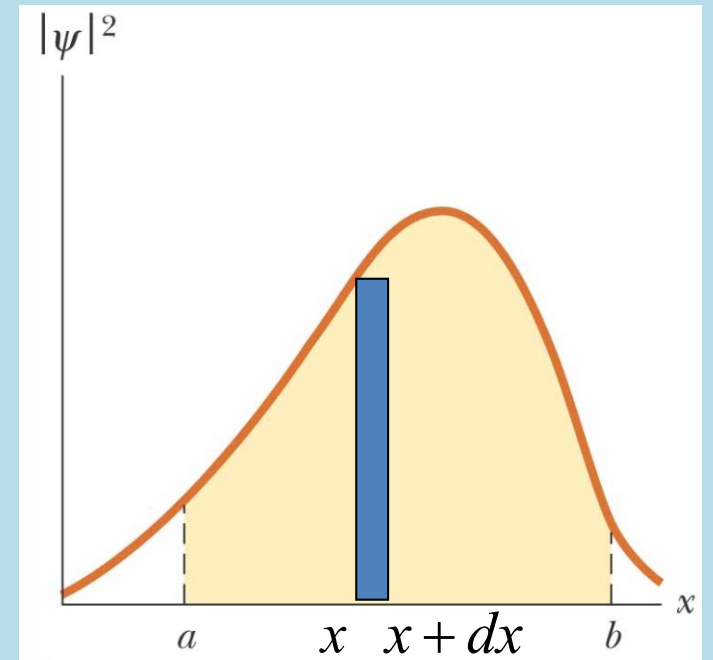


機率密度

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

$$\int_a^b |u_n(x)|^2 \cdot dx$$

在 a 與 b 之間發現該粒子的機率。



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

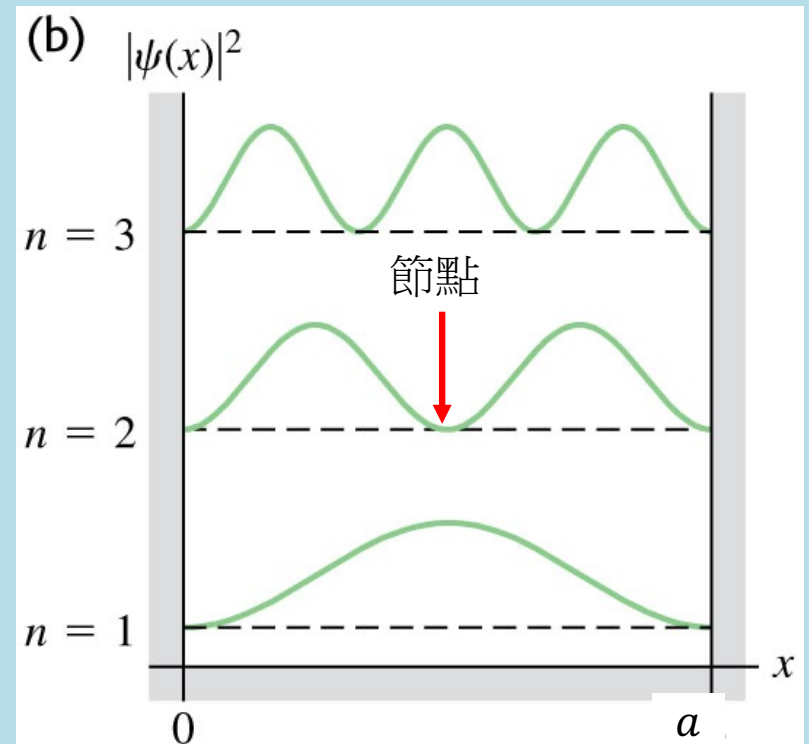
稱為節點。

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！



ψ_n 與弦波駐波的波函數的空間部分 $X(x)$ 一模一樣！

$X(x)$ 對應彈簧組問題中的模式解，模式解是解力矩陣的本徵函數方程式所得。

$\frac{d^2X}{dx^2} = \lambda X$ $X(x)$ 的方程式可以看成是微分算子 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵函數方程式！

加了邊界條件後，方程式的解就是離散分布，以 $n = 1 \dots \infty$ 標定。

$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ 算子 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵函數。

$\lambda_n = -\frac{n^2\pi^2}{L^2}$ 算子 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵值。

$$\frac{d^2X_n}{dx^2} = \lambda_n X_n$$

我們從矩陣的本徵向量的例子，就已經可以猜測出 $X_n(x)$ 的重要性質：

不同本徵值的本徵函數彼此正交(何謂正交?)。

所有滿足邊界條件的函數，都可分解為 X_n 的線性組合！Completeness.完備性。

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

與時間無關薛丁格方程式就是微分算子 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵值方程式！

加了邊界條件後，方程式的解就是離散分布，以 $n = 1 \dots \infty$ 標定。

$$u_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad \text{算子 } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \text{ 的本徵函數。}$$

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8ma^2}\right) n^2 \quad \text{算子 } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \text{ 的本徵值。}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_n}{dx^2} = E_n X_n$$

不同本徵值的本徵函數彼此正交。

Completeness. 完備性。

$$\frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda X \quad \text{微分算子 } \frac{d^2}{dx^2} \text{ 的本徵值方程式！}$$

加了邊界條件後，方程式的解就是離散分布，以 $n = 1 \dots \infty$ 標定。

$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{算子 } \frac{d^2}{dx^2} \text{ 解出來的本徵函數。}$$

$$\lambda_n = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad \text{算子 } \frac{d^2}{dx^2} \text{ 解出來的本徵值。}$$

$$\frac{d^2 X_n}{dx^2} = \lambda_n X_n$$

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

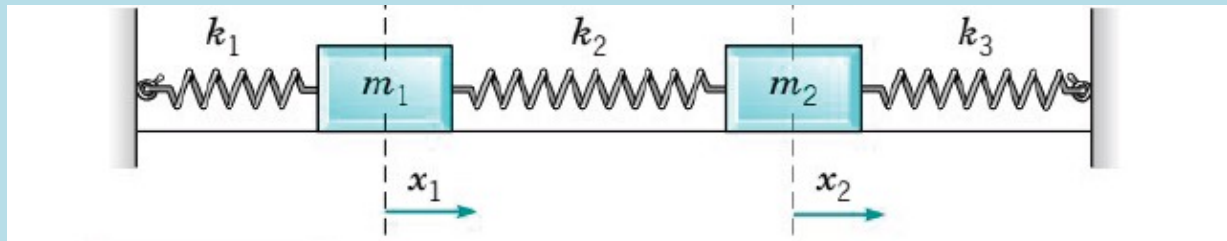
與時間無關薛丁格方程式就是微分算子 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵值方程式！

加了邊界條件後，方程式的解就是離散分布，以 $n = 1 \dots \infty$ 標定。

$$u_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad \text{算子 } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \text{ 解出來的本徵函數。}$$

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8ma^2}\right)n^2 \quad \text{算子 } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \text{ 解出來的本徵值。}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_n}{dx^2} = E_n X_n$$



在之前的三個粒子彈簧組的coupled masses例子

任一起始條件的行向量 $\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ x_3(0) \end{pmatrix}$ ，都可以展開成三個本徵向量的線性組合。

關鍵是：根據對稱矩陣本徵向量的定理，三個本徵向量彼此正交 $\mathbf{a}^{(m)T} \mathbf{a}^{(n)} = \delta_{mn}$

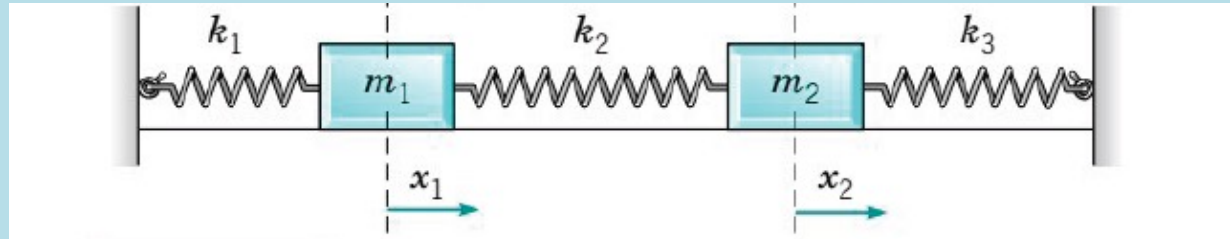
猜測如同矩陣的本徵向量，算子的本徵函數彼此也正交！

函數的推廣的內積

$$\sum_{j=1}^3 \mathbf{a}_j^{(m)T} \mathbf{a}_j^{(n)} = \delta_{mn}$$



$$\sum_{j=1}^{\infty} X_m(dj)X_n(dj) \rightarrow \int_0^L dx X_m(x)X_n(x) =? \delta_{mn}$$



在之前的三個粒子彈簧組的coupled masses例子

根據對稱矩陣本徵向量的定理，三個本徵向量彼此正交： $\mathbf{a}^{(m)T} \mathbf{a}^{(n)} = \delta_{mn}$

猜測如同矩陣的本徵向量，算子的本徵函數彼此也正交！

函數的推廣的內積

$$\sum_{j=1}^3 \mathbf{a}_j^{(m)T} \mathbf{a}_j^{(n)} = \delta_{mn}$$



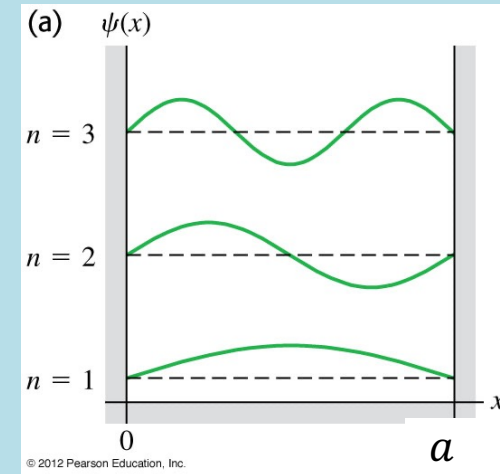
$$\sum_{j=1}^{\infty} X_m(dj)X_n(dj) \rightarrow \int_0^L dx X_m(x)X_n(x) =? \delta_{mn}$$

u_n 是正弦函數。

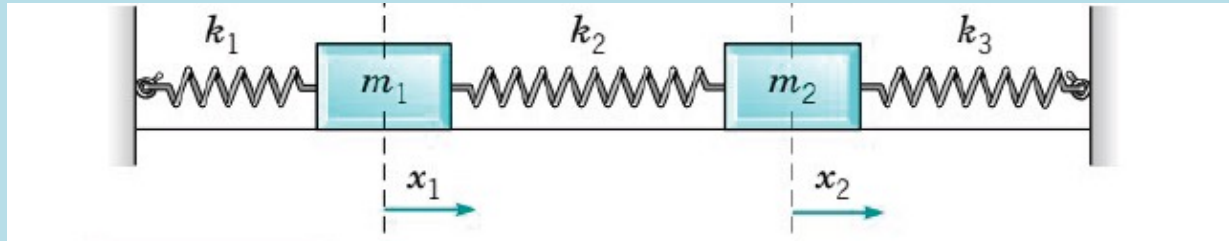
正弦函數 u_n 滿足正交定理，Orthogonality。

不同本徵值的本徵函數彼此正交！正交的意思是：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n^*(x) u_m(x) = \int_0^a dx \cdot u_n^*(x) u_m(x) = \delta_{mn}$$



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



在之前的三個粒子彈簧組的coupled masses例子

任一起始條件的行向量 $\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ x_3(0) \end{pmatrix}$ ，都可以展開成三個本徵向量的線性組合。

$$\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ x_3(0) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{a}^{(i)} c_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} c_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} c_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} c_3$$

所有滿足邊界條件的函數都可分解為 $X_n(x)$ 的線性組合！

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

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：

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

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

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



$$c_i = \mathbf{a}^{(i)T} \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ x_3(0) \end{pmatrix}$$

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！

EXAMPLE 3-5

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

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

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

SOLUTION We want to calculate A_n in the expansion

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

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

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

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

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

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

so that

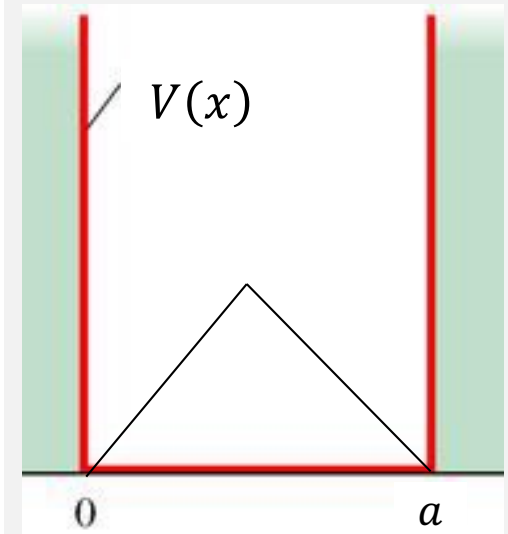
$$\begin{aligned}|A_n|^2 &= \frac{96}{\pi^4 n^4} & \text{for } n \text{ odd} \\ &= 0 & \text{for } n \text{ even}\end{aligned}$$

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

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

that the sum of all the probabilities is 1:

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



這一展開式提供對無限大位能井位能下薛丁格波方程式的普遍解法：

將 $t = 0$ 時的波函數，即起始條件，對定態解 u_n 展開如下：

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

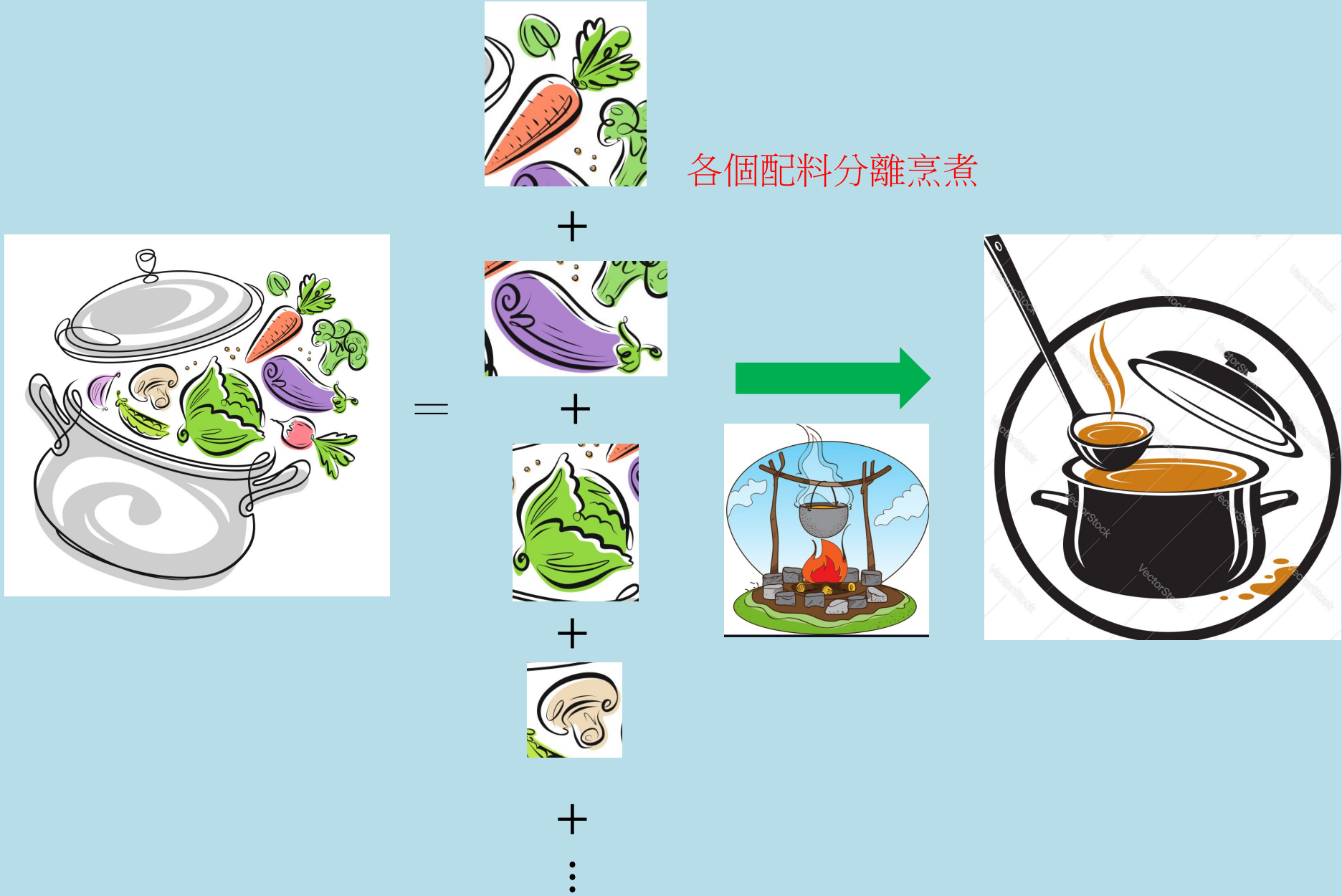
$t = 0$ 時此狀態可以視為定態 u_n 的如上疊加，

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

乘完之後依同樣方式疊加，整個波函數也就滿足薛丁格波方程式。

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

很明顯，這個程序不只適用於無限大位能井，原則上適用於任何位能。

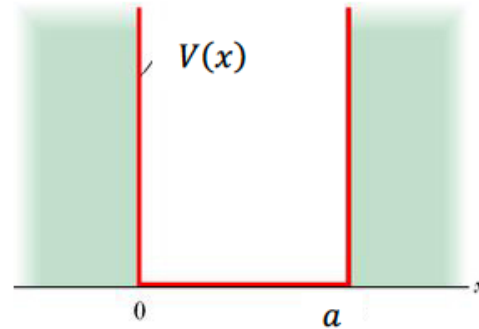


各個配料分離烹煮

一個量子系統的定態決定了此系統的物理性質。

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

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



As we have shown in class, in this potential the energy eigenstate can be written as

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \text{ with eigenvalues } E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\pi^2}{a^2} n^2 \text{ (you can use the notation } E_n \text{ to simplify}$$

your answers) . Assume the wavefunction of a particle at $t = 0$ (probability already normalized to one) is:

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

A. For a later time t , write down the wave function $\psi(x, t)$. There is no need to simplify the answer. (15)

B. At $x = \frac{a}{6}$, calculate the probability density $P\left(\frac{a}{6}, t\right)$ as a function of time t .

解答：

A. $t = 0$ 時此狀態可以視為定態 $u_{1,2}$ 的如上疊加，接著定態隨時間個自演化，位能下薛丁格方程式要求 u_n 乘上 $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ 。乘完之後依同樣方式疊加，整個波函數也就滿足薛丁格波方程式。因此

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{4}{5}} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \sqrt{\frac{1}{5}} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}。$$

$$\text{B. } \Psi\left(\frac{a}{6}, t\right) = \sqrt{\frac{4}{5}} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{6} \right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \sqrt{\frac{1}{5}} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{3} \right) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

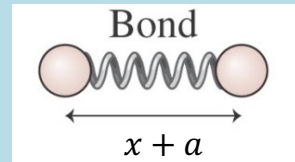
$$= \sqrt{\frac{2}{5a}} \left(2\frac{1}{2} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \right)$$

$$P\left(\frac{a}{6}, t\right) = \left| \Psi\left(\frac{a}{6}, t\right) \right|^2 = \frac{2}{5a} \left| e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \right|^2$$

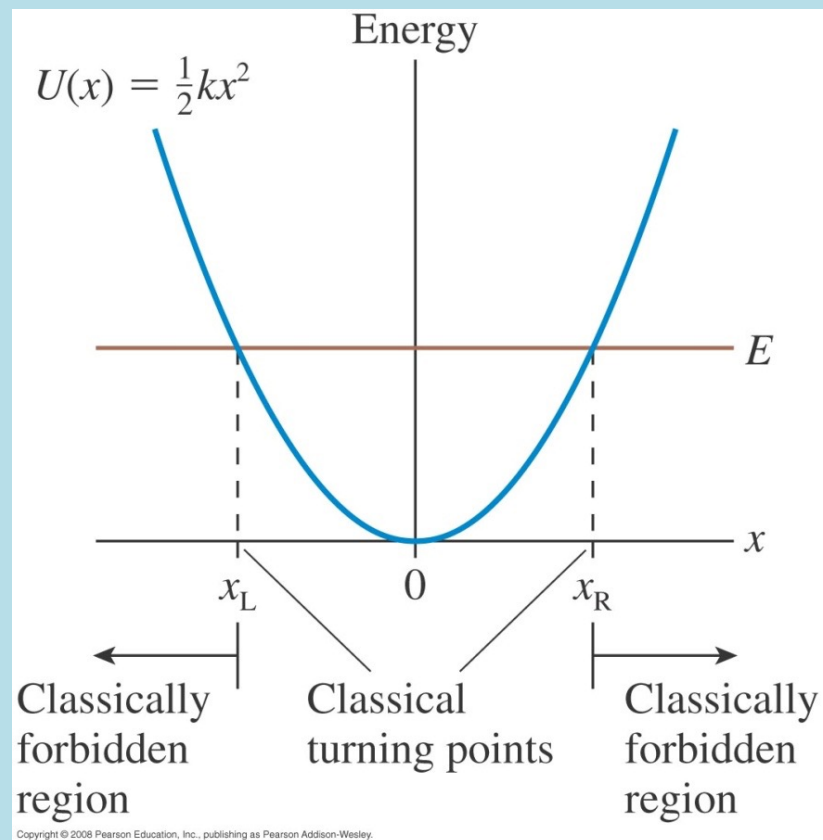
簡諧振盪器、量子彈簧、1D位能束縛態

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

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



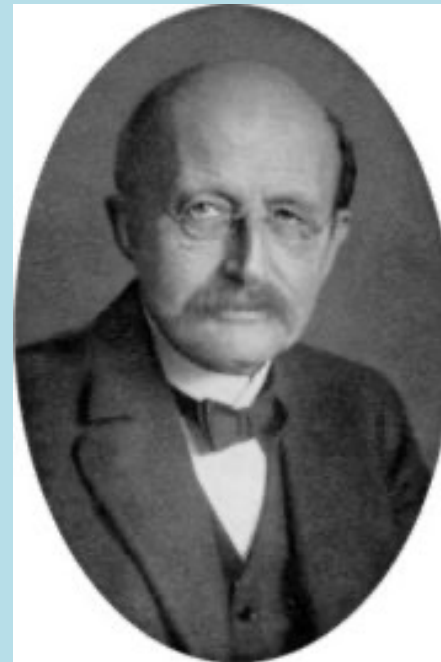
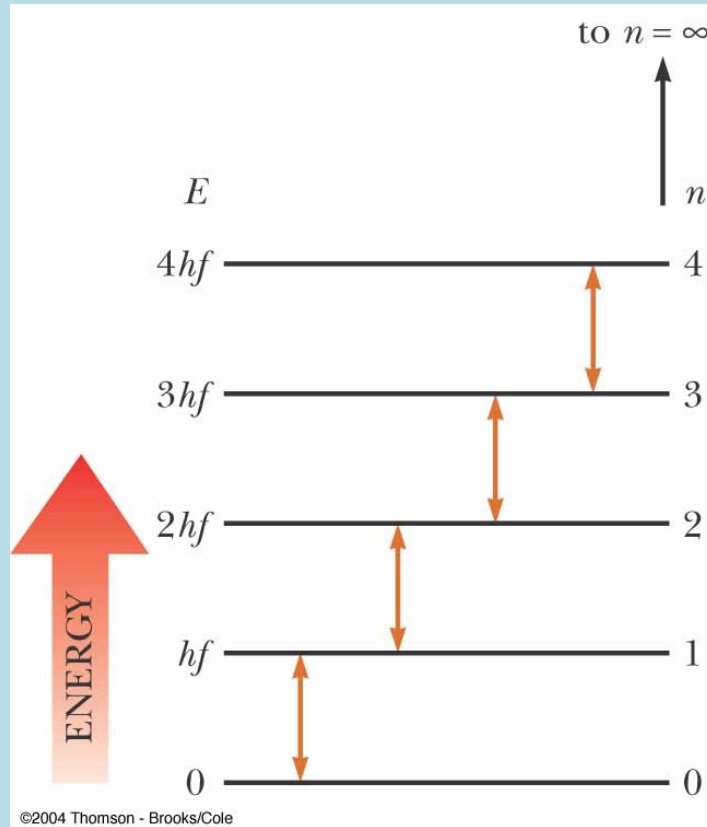
最簡單的量子彈簧就是雙原子分子！



黑體輻射以及空腔輻射也是一系列的量子彈簧。

如果要解釋黑體輻射，量子彈簧的能量變化必需是能階狀的！

Max Planck 在1900 開啟了量子革命的第一槍！



量子彈簧的能量不是連續的，而是固定量子的整數倍（離散型式）

量子(Quantum)的大小與頻率成正比！

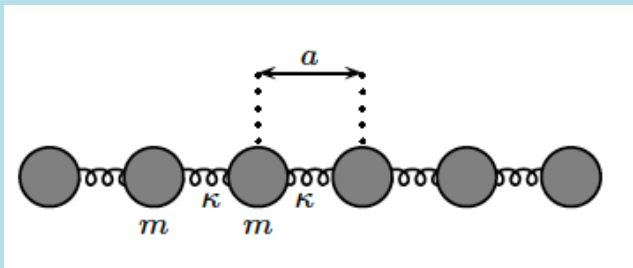
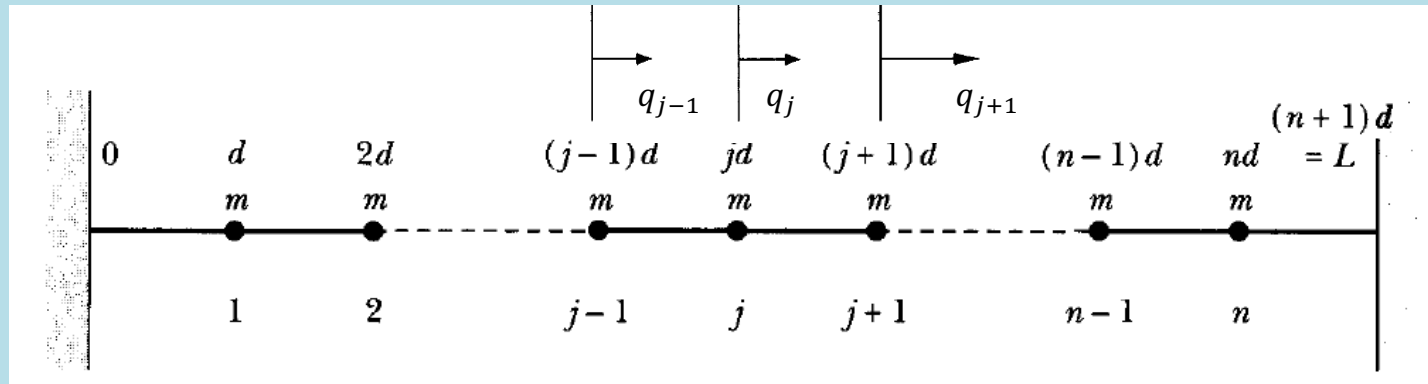
$$E_n = n \cdot hf \quad h: \text{Planck Constant}$$

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



12.9 The Loaded String*

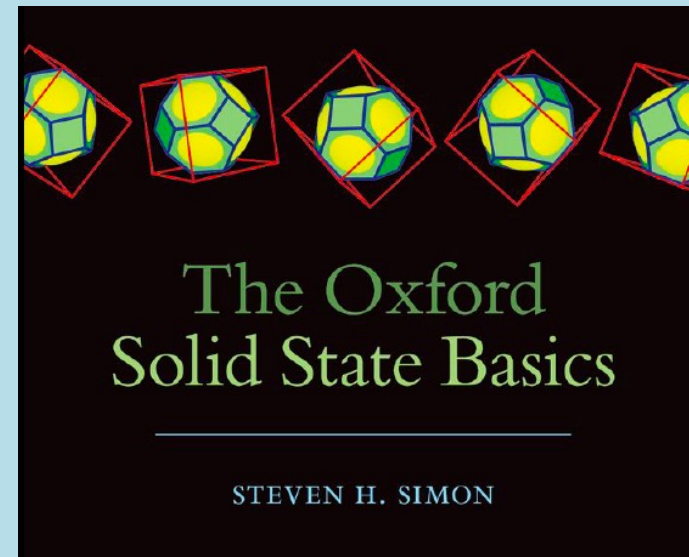
固體內原子晶格的振動也是一系列量子彈簧



Vibrations of a One-Dimensional Monatomic Chain

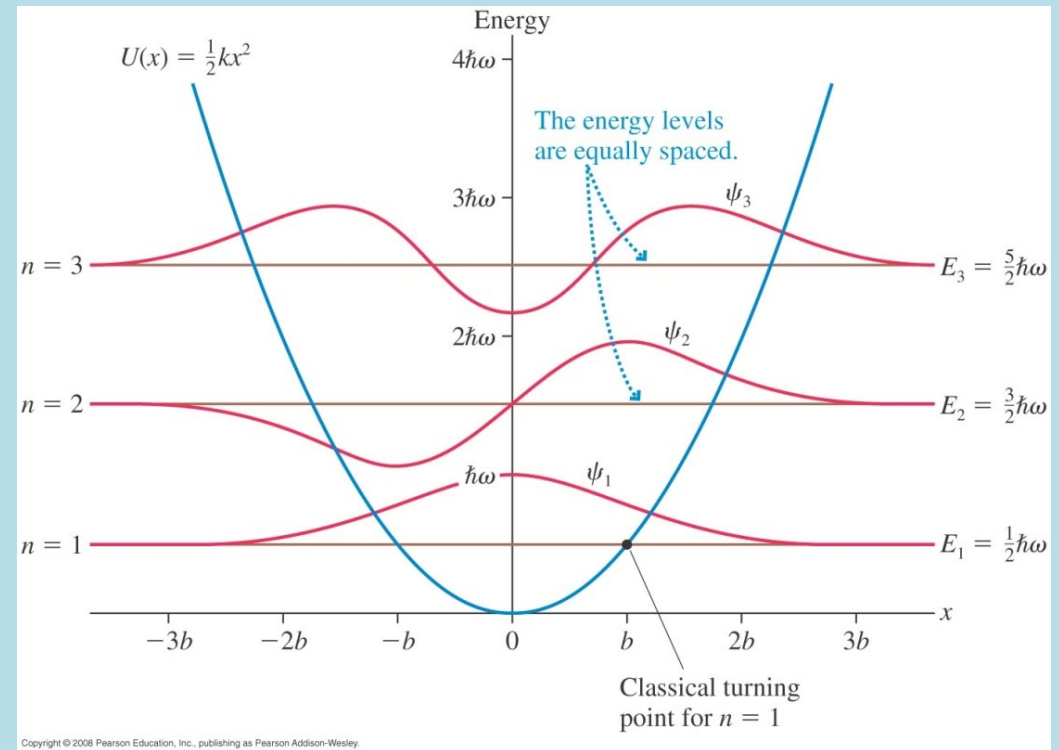
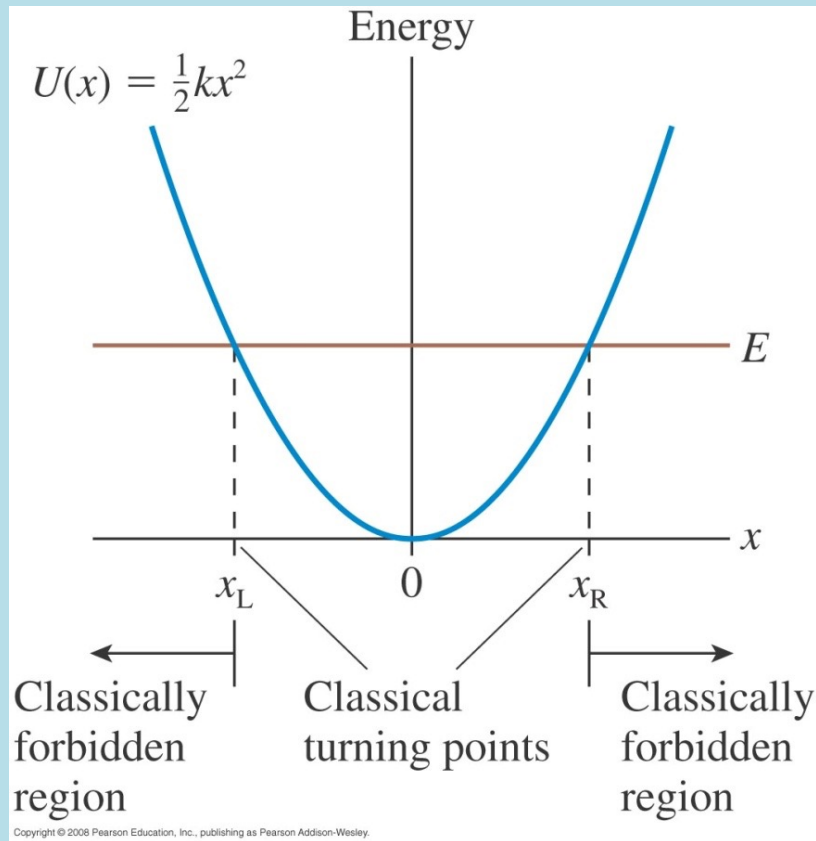
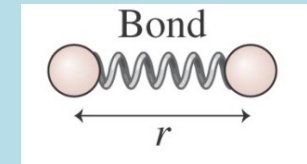
9

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



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

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



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

波函數會進入古典禁止區域

能量是量子化的！

ANNALEN DER PHYSIK.

VIERTE FOLGE. BAND 79.

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

Quantisation as an eigenvalue problem;
 by E. Schrödinger*

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

1. Der Plancksche Oszillator. Die Entartungsfrage.

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

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

Die potentielle Energie sei

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

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

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

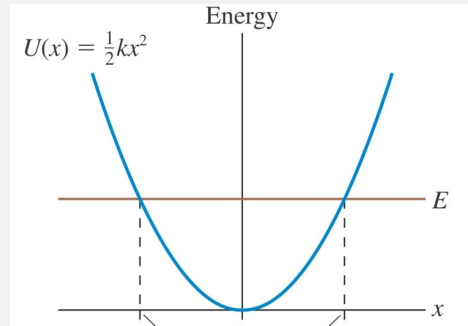
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

先讓我們定性的來猜一下它的定態解。

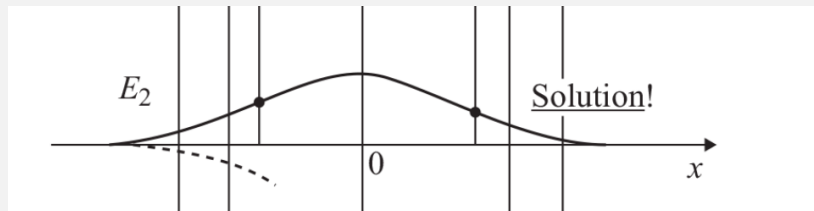


Scanned at the American Institute of Physics

彈力位能是左右對稱的，對稱點在原點： $x = 0$ 。



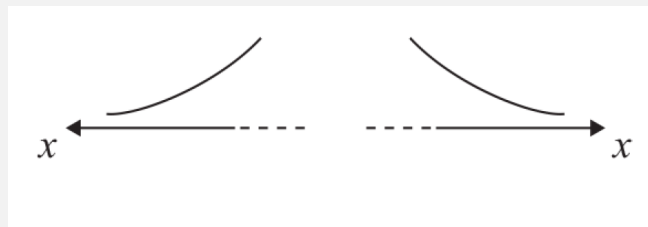
物理結果應該左右對稱，所以，定態方程式的解 ψ 或許也是對稱的？例如：



這樣的對稱的解稱為：偶函數。

偶函數在原點的斜率必須為零！斜率在原點才能連續。

在無限遠處，可以猜想到， ψ 及其斜率 ψ' 會漸漸趨近於零。
 $x \rightarrow \infty, \psi, \psi' \rightarrow 0$ ，在 $x \rightarrow -\infty$ 附近，會與 $x \rightarrow \infty$ 對稱！如下：



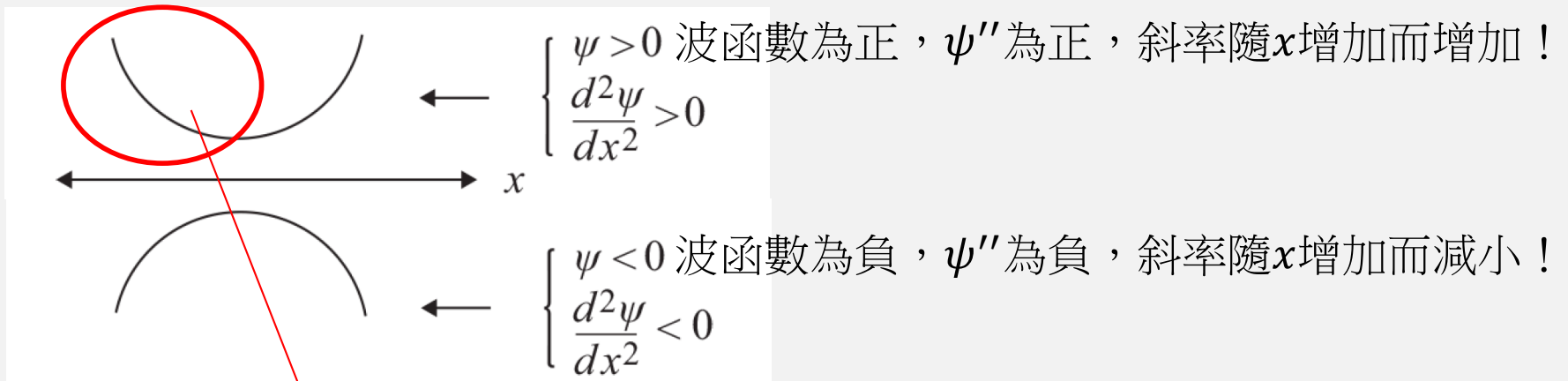
在 $x \rightarrow \pm\infty$ 兩者之間，解的變化就由方程式決定，我們也有一些定性的了解：

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

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

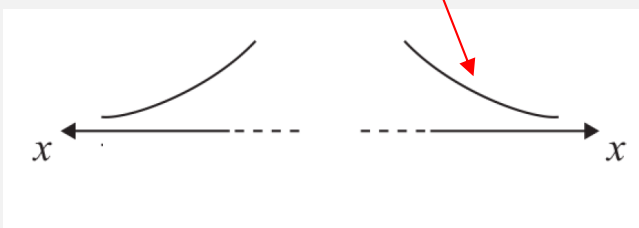
$V(x) - E$ 的正負號會決定 $\frac{\psi''}{\psi}$ 的正負號！而 ψ'' 是斜率的變化！

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



通常就說：古典不容許的區域， x 增加時，波函數會趨離 x 軸而彎曲。

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

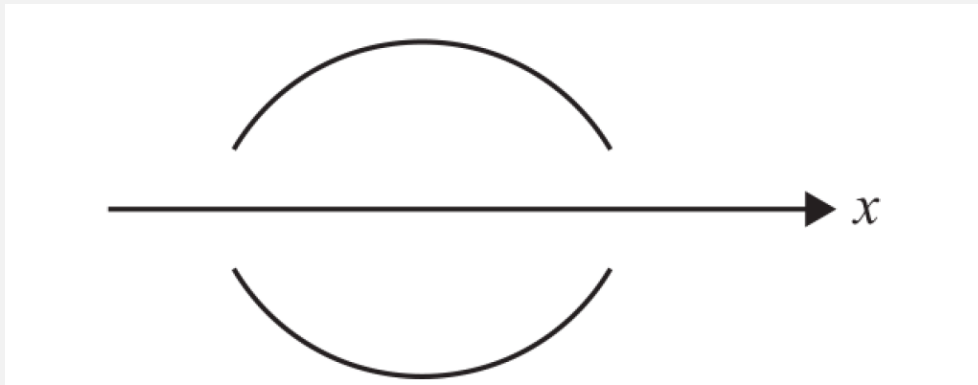


定性上類似指數遞減。

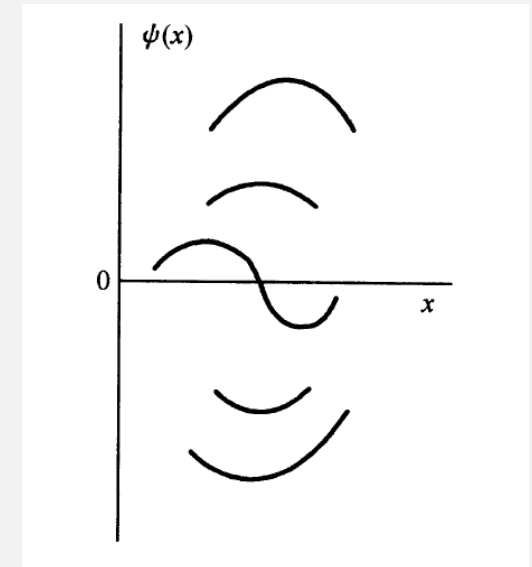
$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

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

波函數 ψ 為正時， ψ'' 為負，斜率隨 x 增加而減小！



波函數 ψ 為負時， ψ'' 為正，斜率隨 x 增加而增加！



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

結論：在古典不容許的區域，定性上類似指數遞減！

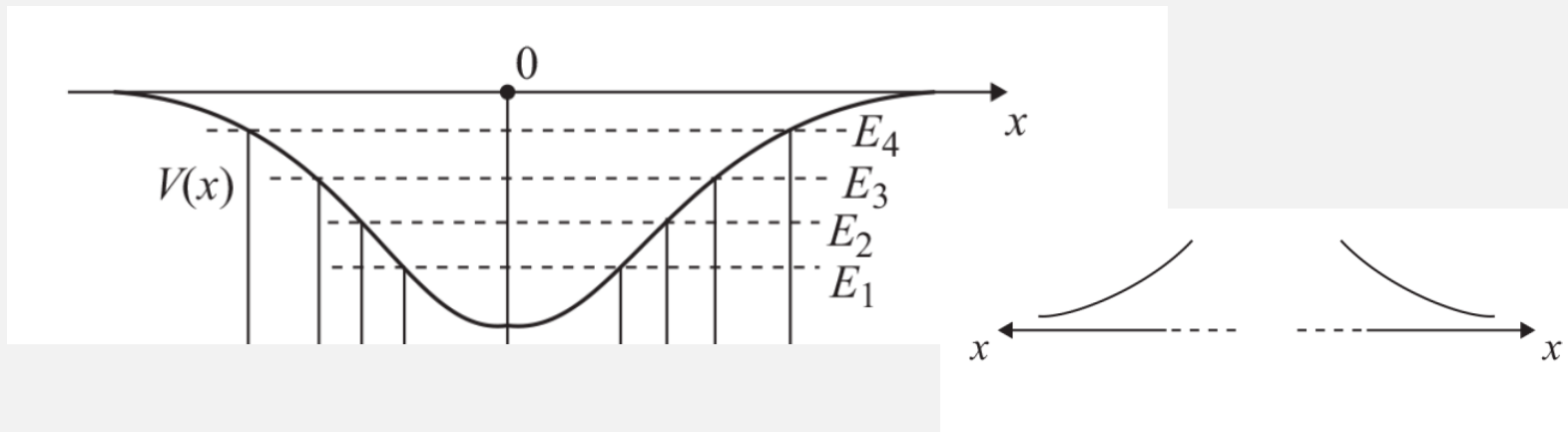
在古典容許的區域，定性上類似來回振盪！

策略：考慮一系列的能值，大小不同，因此折返點不同。

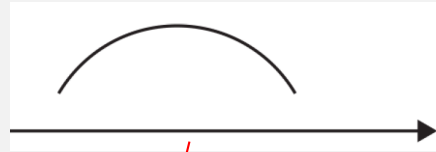
已知當 $x \rightarrow \infty$ ，波函數解 ψ 及其斜率 ψ' 會趨近於零。

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

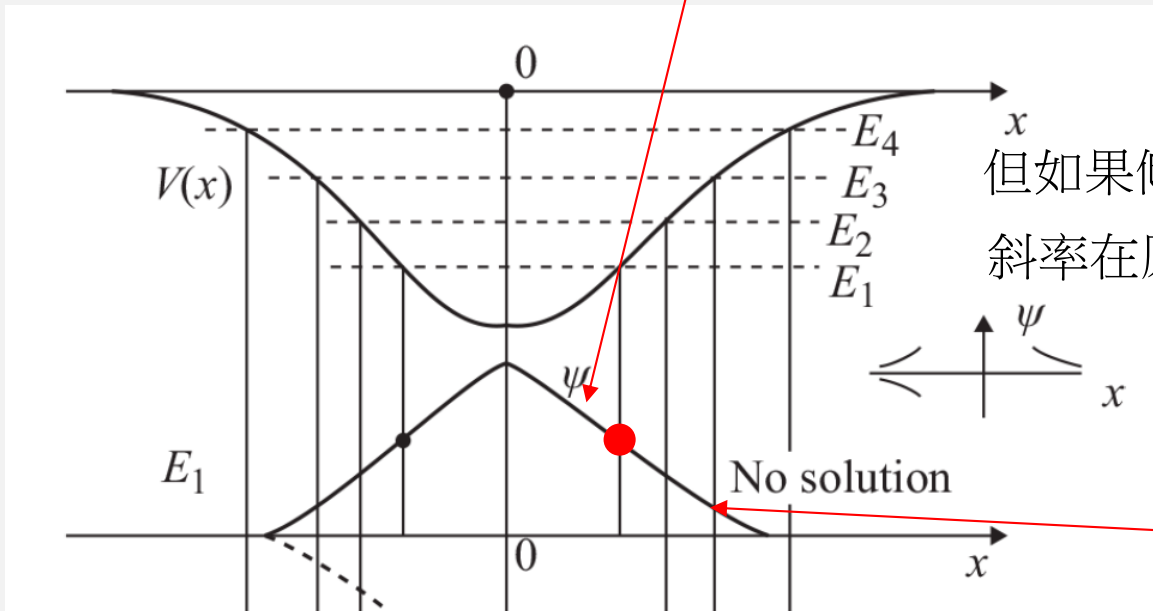
而當地 $V(x) - E$ 的正負號，也就是是否為古典容許區域，會決定 $\frac{\psi''}{\psi}$ 的正負號！



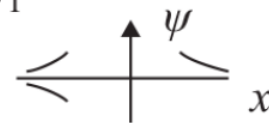
對於 E_1 ：



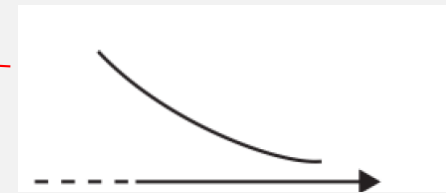
在折返點內，曲線趨向 x 軸彎曲。
向原點靠近時，傾斜度開始漸漸下降！



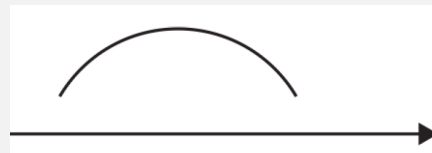
但如果傾斜度到達原點，來不及降為零！
斜率在原點就無法連續，此解不成立！



如圖，對於 E_1 ，沒有解！

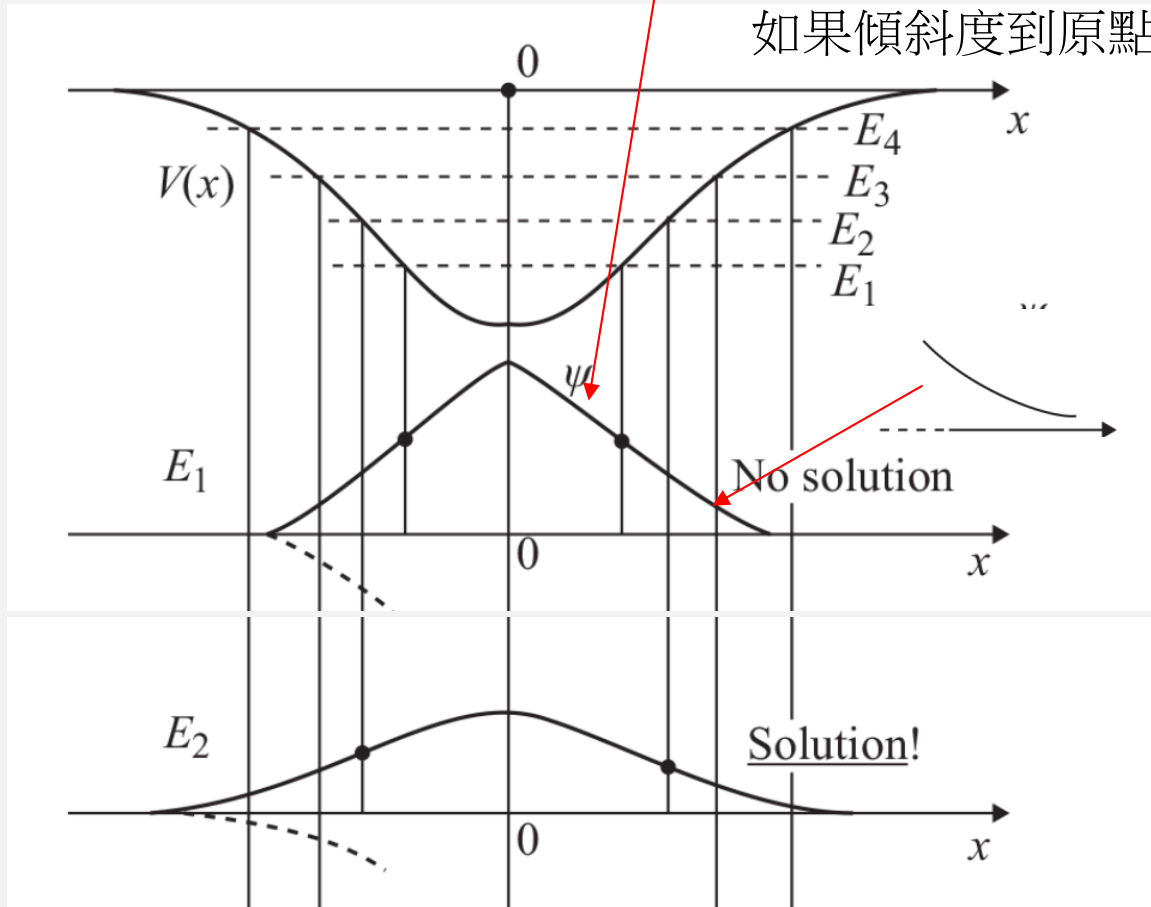


折返點外，從無限遠傾斜度為零，這是古典不容許的區域， $\frac{\psi''}{\psi}$ 為正。
往內走，負的斜率繼續減小。傾斜度增加。



由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！
到折返點後，傾斜度又漸漸減小。

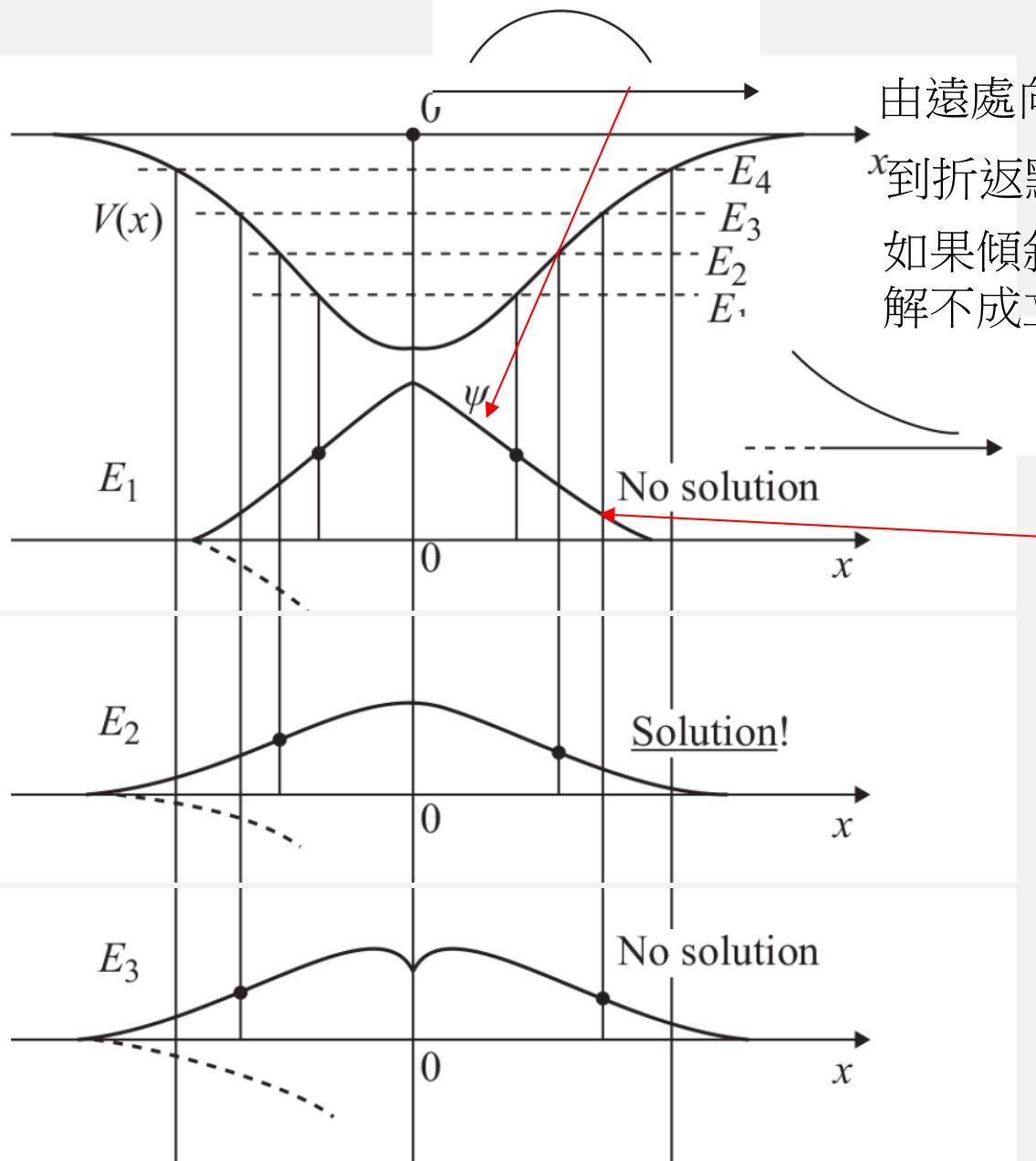
如果傾斜度到原點，來不及降為零，解不成立。



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

所以條件必須剛好成立，定態方程式才会有解！

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

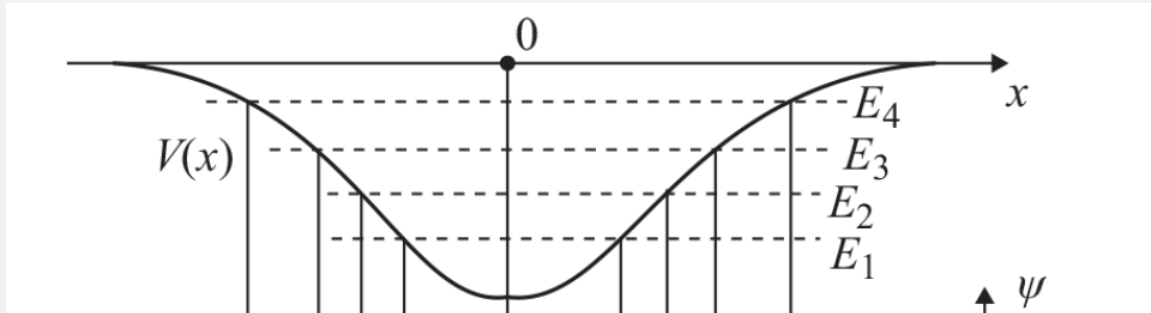


由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！
 x 到折返點後，傾斜度又漸漸減小。
 如果傾斜度到原點，來不及降為零，
 解不成立。

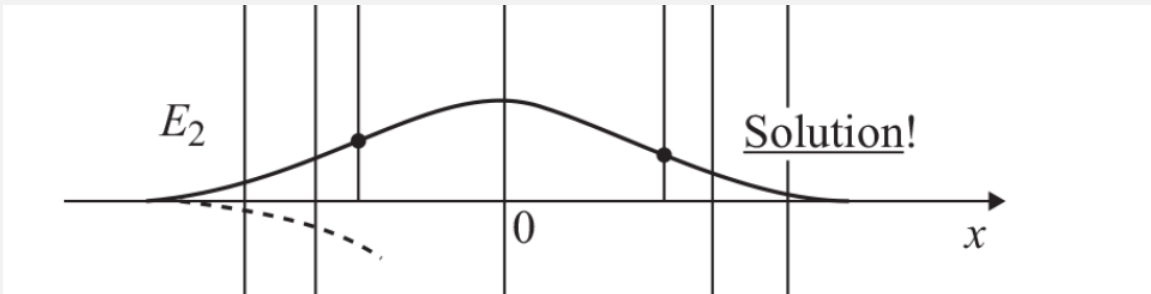
對於 E_2 ，折返點右移！
 傾斜度有較大間隔下降！
 傾斜度在原點恰好降為零！
 $E = E_2$ ，定態方程式有解！

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

位能左右對稱，



定態方程式的解是對稱的：偶函數。

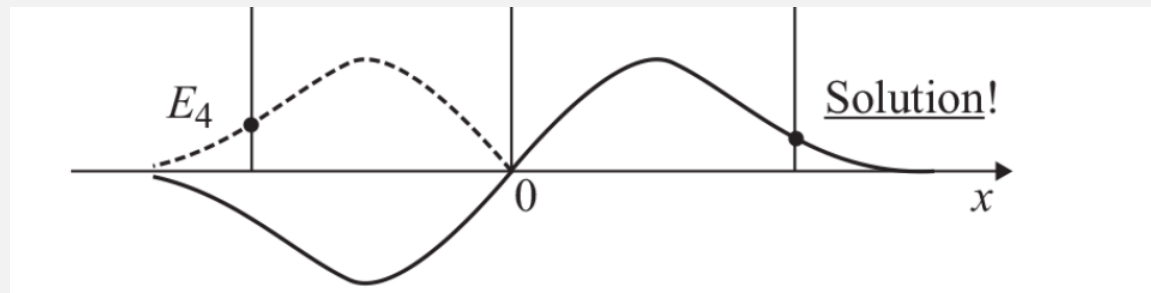


偶函數在原點的斜率必須為零！

物理應該對稱，但物理是由狀態函數的平方決定，

狀態波函數也可以是反對稱，意思是右邊函數式左邊函數乘 -1 。

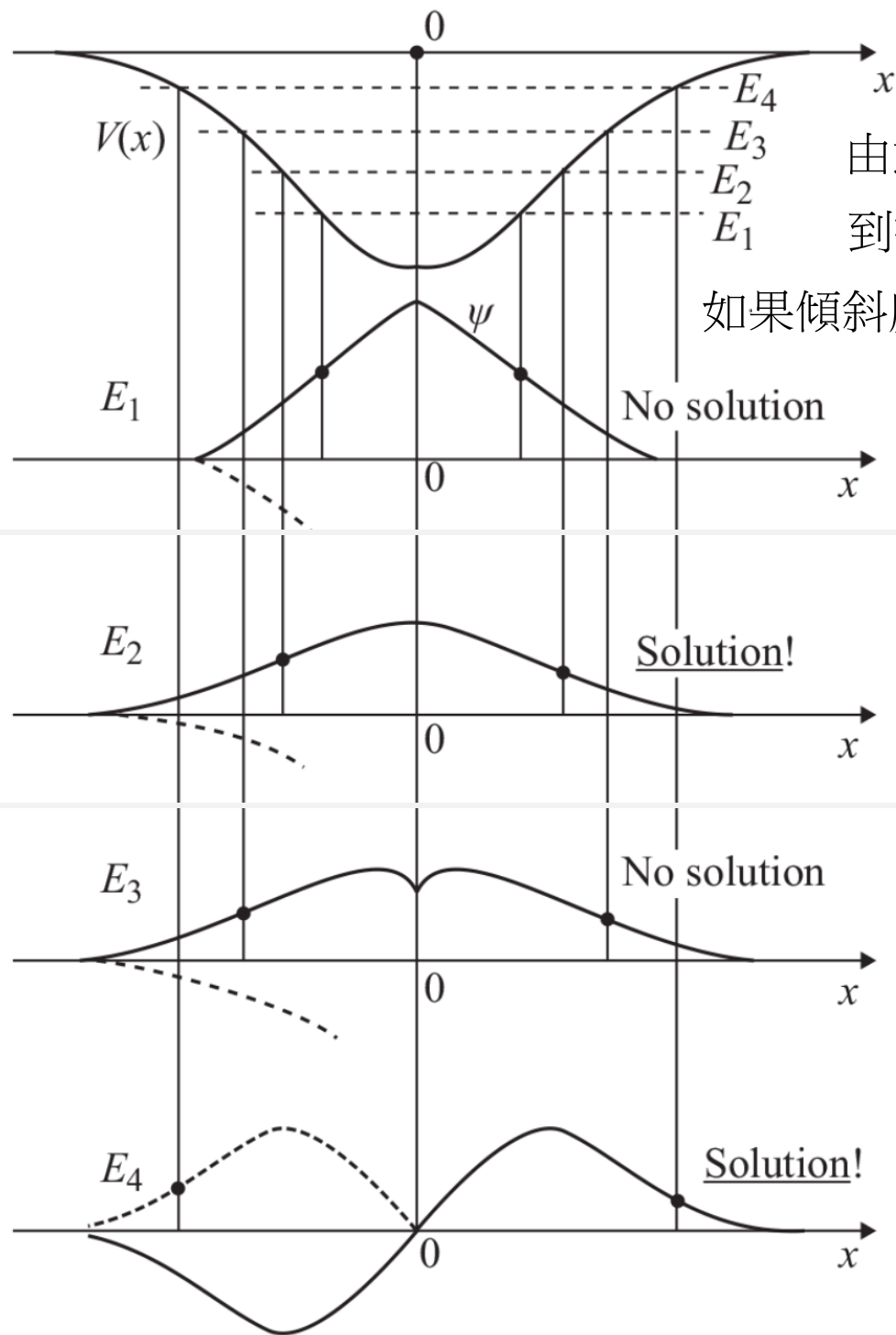
定態方程式的解也可以反對稱的：稱為奇函數，例如：



但注意！如此奇函數在原點的函數值必須為零！

見課本3-6

有較細緻的討論。



由遠處向原點靠近，傾斜度漸漸增加！

到折返點後，傾斜度又漸漸減小。

如果傾斜度到原點，來不及降為零，解不成立。

對於 E_2 ，折返點右移！

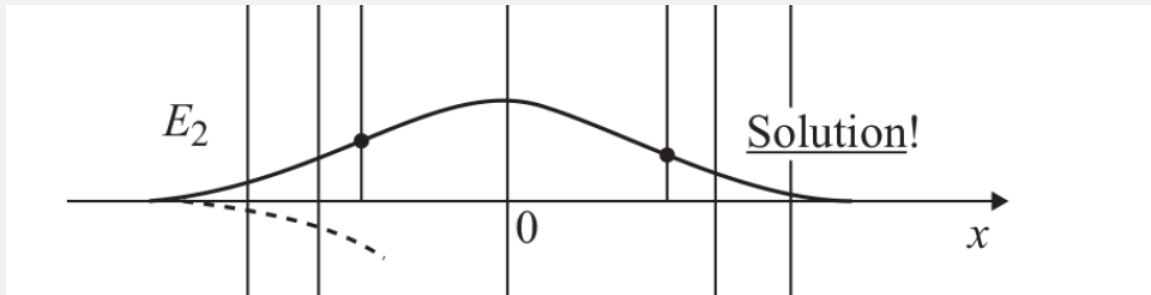
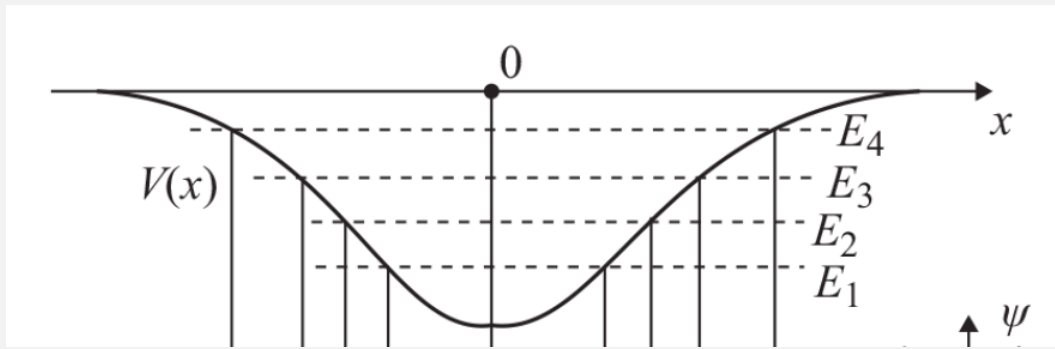
傾斜度有較大間隔下降！

傾斜度在原點恰好降為零！

$E = E_2$ ，定態方程式有解！

對於大於 E_2 的 E_3 ，斜率在原點前變號，但函數不為零！解不成立。

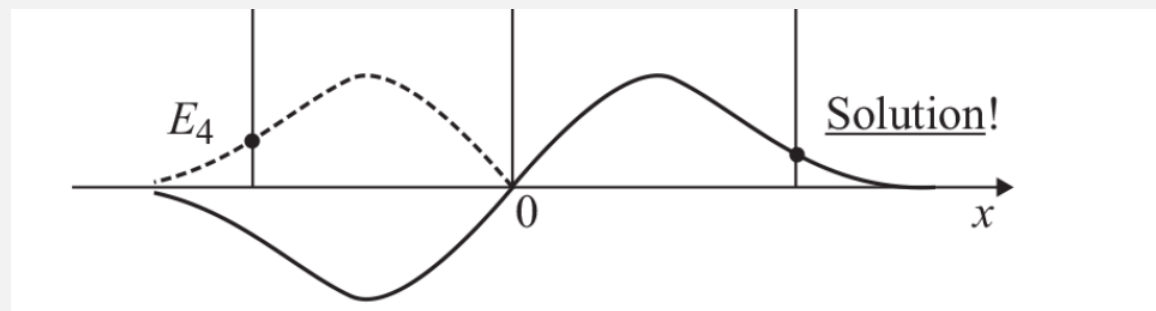
但直到某更大的 E_4 ，原點函數值降為零，此解成立。是一奇函數解！



這是偶函數。

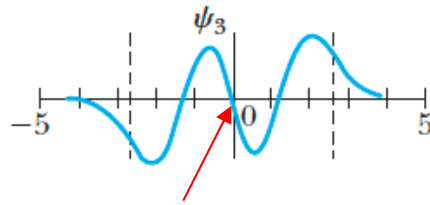
所以條件必須剛好成立，定態方程式才会有解！

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

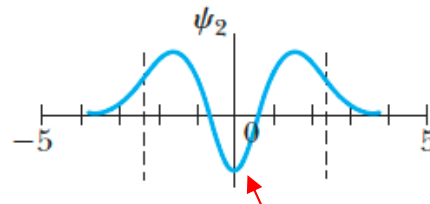


這是奇函數。

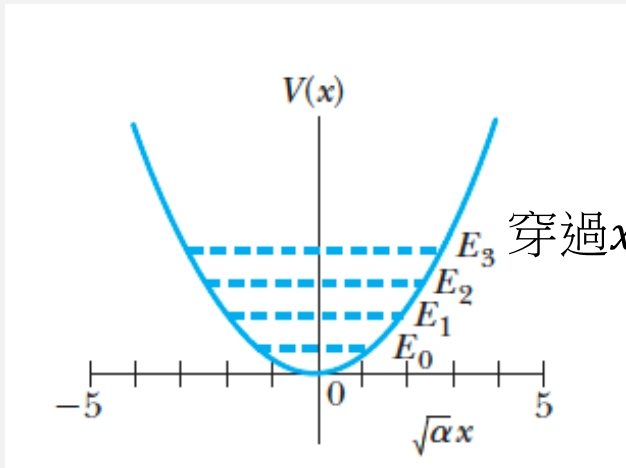
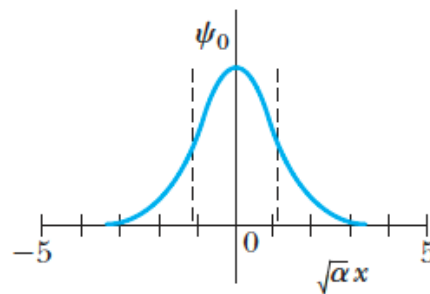
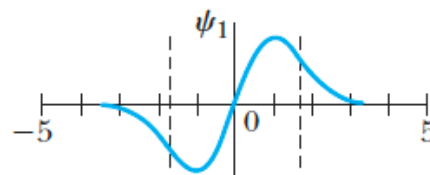
能量必須使得傾斜度在 ∞ 由零加大，在折返點開始減小直到變號，函數值開始減小，同時使函數值在原點恰降到零！



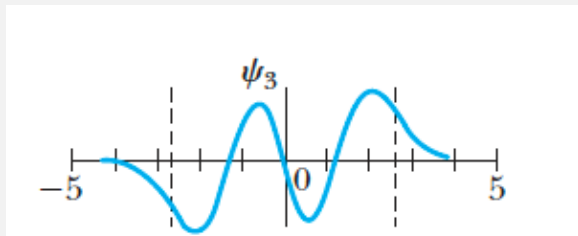
穿過 x 軸一次，奇函數在原點的函數值必須為零！



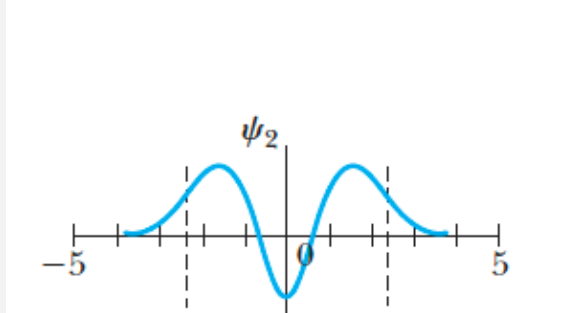
穿過 x 軸一次，偶函數在原點的斜率必須為零！



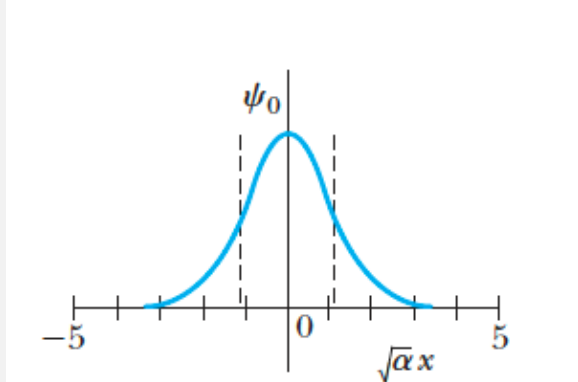
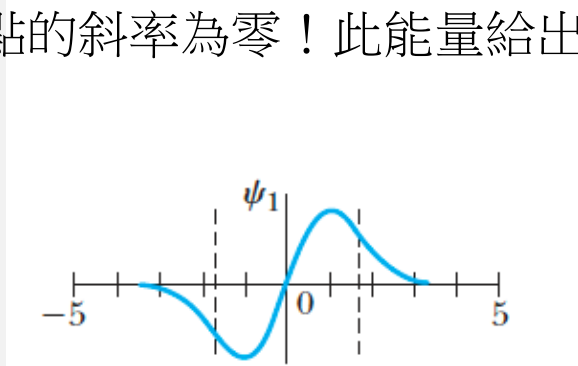
能量再增加，折返點距原點越遠，函數曲線可以來回穿過 x 軸數次，但必須滿足以上條件才是解。



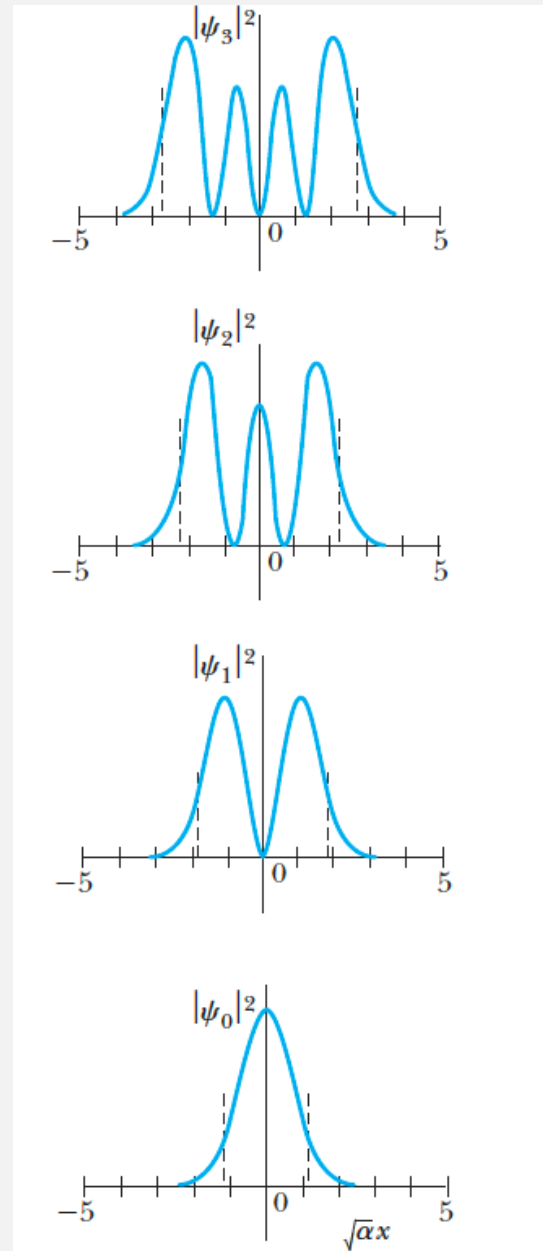
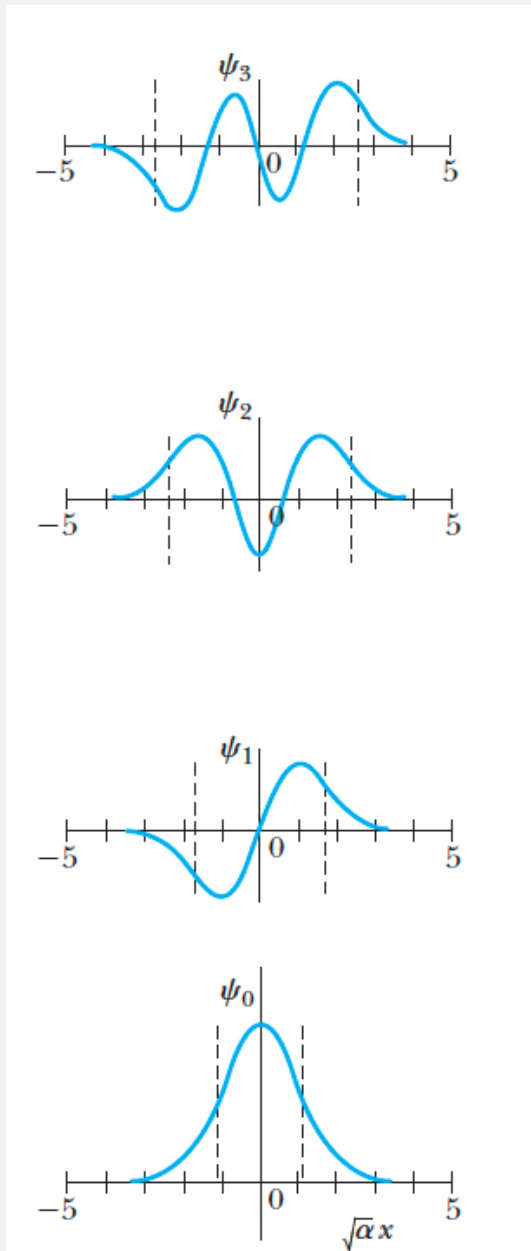
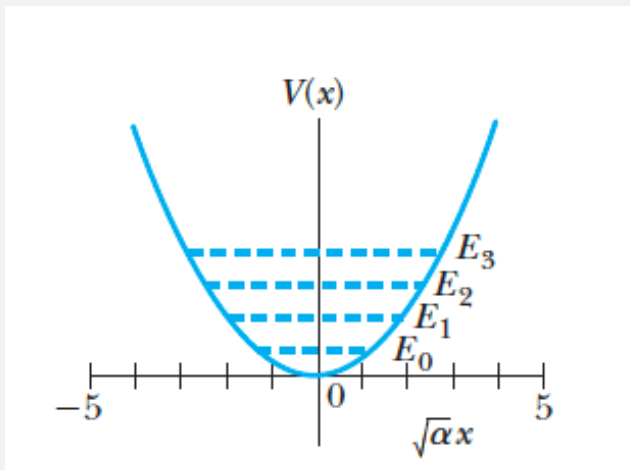
穿過 x 軸一次後使奇函數在原點的函數值為零！此能量給出一個解，共穿過 x 軸三次。



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

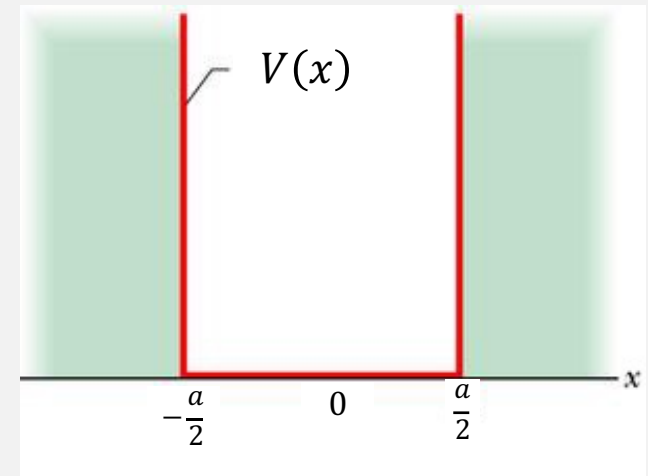
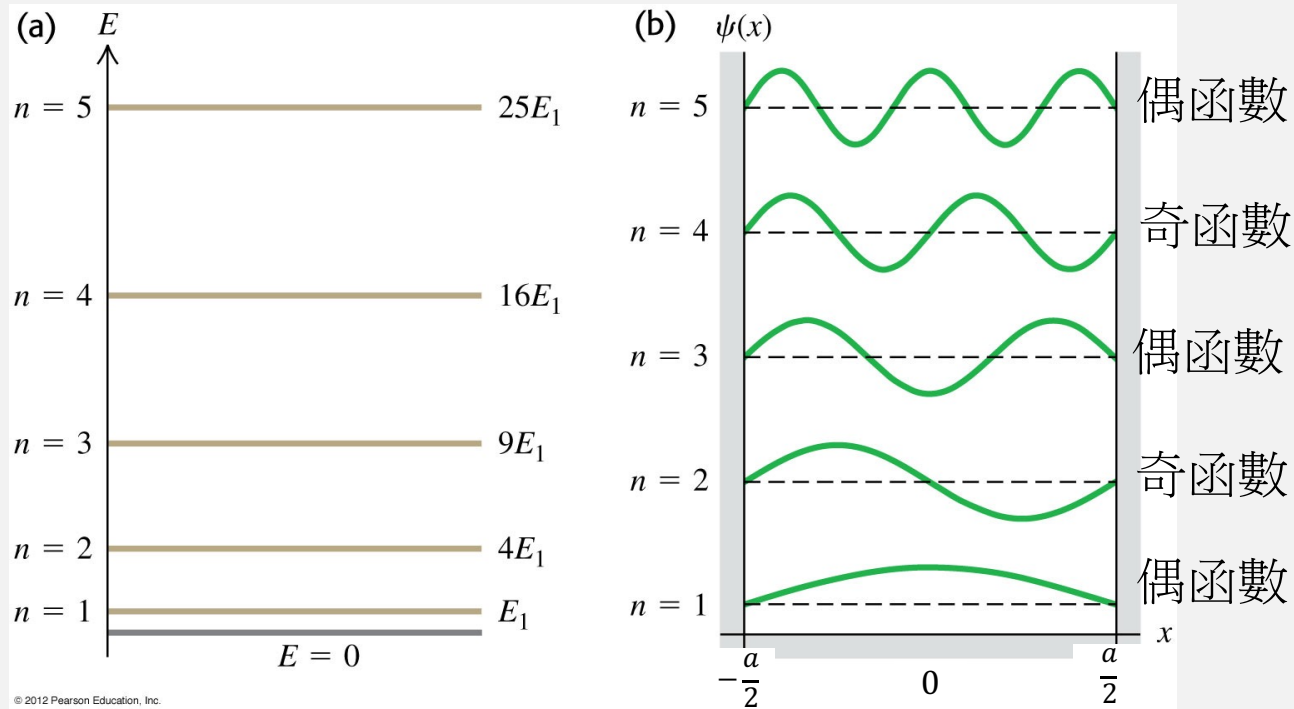


第 n 個能階定態解會有個 $n - 1$ 個Node節點。



偶函數、奇函數隨能量增加間隔出現！

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



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

偶函數、奇函數也是間隔分佈！

偶函數在原點的斜率為零，奇函數在原點的函數值必須為零

第 n 個能階定態解會有個 $n - 1$ 個 Node 節點。

We can do better! Solving the Equation!

1926.

№ 6.

ANNALEN DER PHYSIK.
VIERTE FOLGE. BAND 79.

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

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

1. Der Plancksche Oszillator. Die Entartungsfrage.

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

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

Die potentielle Energie sei

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

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

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



Scanned at the American Institute of Physics

$$\psi(x) \equiv u(x)$$

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



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

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

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 u + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0$$

Linear second order ODE 解法

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = f(x)$$

Variation of parameters
Wronskian

Linear ODE

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = f(x)$$

If we find **one** solution of the homogeneous ODE, we can calculate the general solution.

Complex number 複變函數法

Linear ODE with constant coefficients

$$y'' + a_1 y' + a_0 y = f(x)$$

We can find general solutions using complex number exponential function $e^{\alpha t}$.

級數法 Series

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

很神奇又自然的：我們可以取任一個較方便的長度單位來解此方程式。

得到解後再換算回原單位！

$$\frac{m\omega}{\hbar} \quad \text{單位是長度平方的倒數。}$$

單位是長度。

我們可以選擇長度單位使 $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ 的數值等於1。

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

這等價於引進新的變數 y ，來吸收第一個常數。

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

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



$$\frac{d^2u}{dy^2} = y^2u - \frac{2E}{\hbar\omega}u$$

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



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

薛丁格怎麼解這個方程式？

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

Sei zur Abkürzung

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

also

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

Wir führen als unabhängige Variable ein

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

und erhalten

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

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

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

Die Eigenfunktionen sind die *Hermite'schen Orthogonalfunktionen*

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

他直接知道答案！

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

這是一個指數遞減的高斯分佈函數，乘上一個Hermite多項式！

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

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

而且有限次多項式在無限遠處會發散，不符合定態的要求。

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

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

但薛丁格如何猜到正確的 $u_0 = e^{-\frac{y^2}{2}}$ 呢？ $u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$

猜想：在 $y \rightarrow \infty$ ， u_0 必須趨近於零，且比多項式 h 重要，才能使整個解趨零。

在 $y \rightarrow \infty$ ，多項式相比之下如一個常數：

$$u \sim u_0$$

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

而在無限遠處 $y \rightarrow \infty$ ，微分方程式的第二項比第三項重要。 $y^2u_0 - \varepsilon u_0 \rightarrow y^2u_0$

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



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

解出此方程式就可以得到 u_0 。

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

我們直接代入驗證：

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

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

因此如果這樣設定：

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

$h(y)$ 就可能有有限次多項式的解！

$h(y)$ 滿足的方程式為：

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

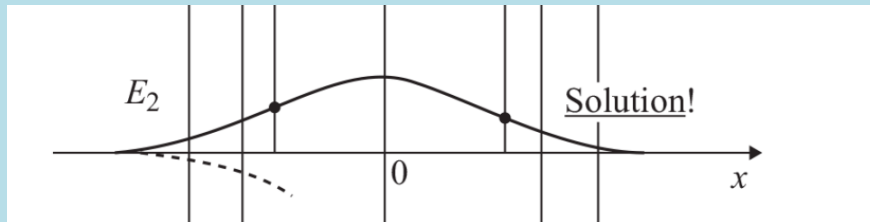
$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0 \quad y^2 h(y) \text{真的消失了。}$$

後兩項是同次多項式，第一項則較低次，故後兩項的最高次項可以彼此抵消。

讓我們先感覺一下這個函數 $u(y)$ 的特性：

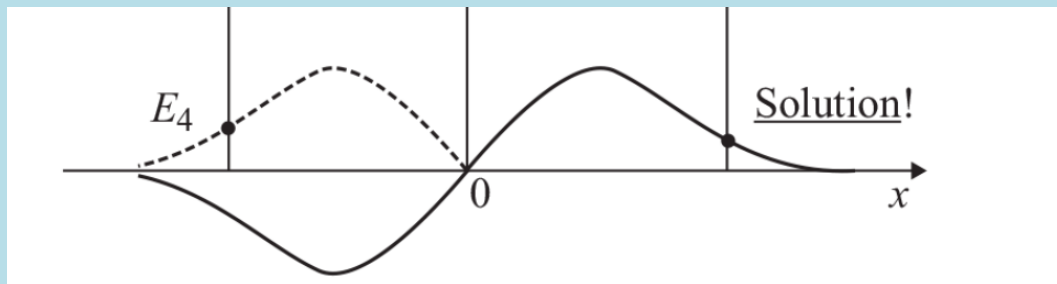
$$u(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} \times (\text{一個特別的多項式})$$

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



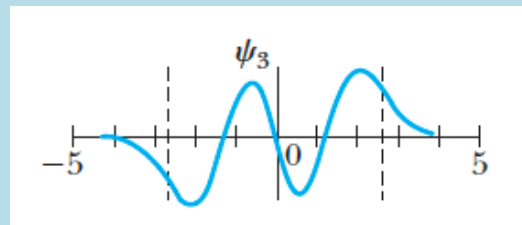
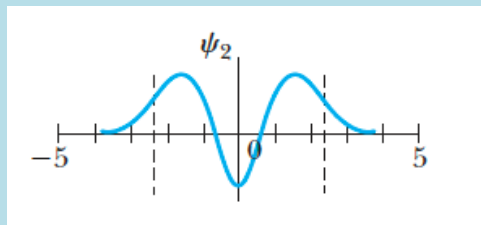
這是偶函數。

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



這是奇函數。

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



以上是一個猜測的過程，是否可行，必須直接求解：

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

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

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

代入後先看各項的最高次的貢獻：

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

第一項的貢獻其實小兩次，在此可以先忽略。第二項與第三項必須抵消。

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

簡化後得到一個極漂亮的式子：

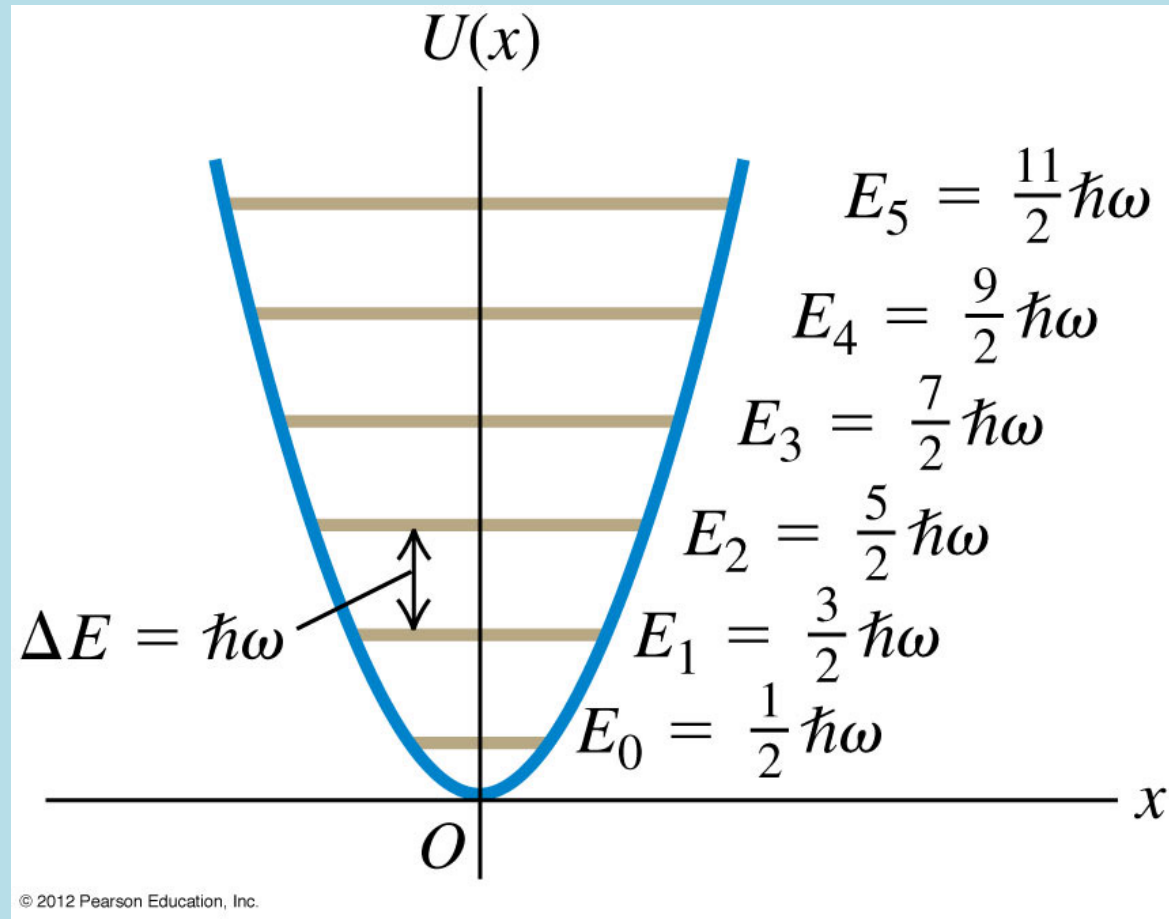
$$-2n + (\varepsilon - 1) = 0 \quad n \text{ 是多項式解的幕次，} \varepsilon \text{ 是該解對應的能量。}$$

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

只有當 ε 為奇整數時，方程式才有可歸一化的有限次多項式解！

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

量子簡諧運動的能量是量子化的！



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

完整的解可以以Recursion遞迴關係得到：

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

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

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

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

收集 y^i 的項，係數必須為零：

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

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

Recursion遞迴關係

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

Recursion遞迴關係

注意多項式中偶數次項是偶函數，奇數次項是奇函數。

偶函數： n 是偶數

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

分子為零 $a_{n+2} = 0$ 遞迴停止。

其餘奇數次項係數都為零。

奇函數： n 是奇數

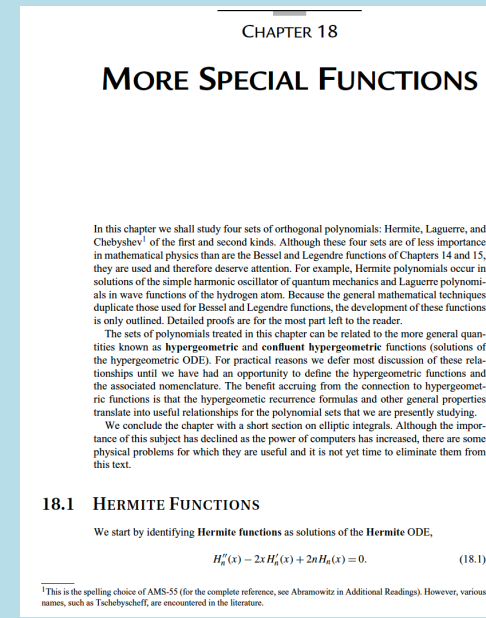
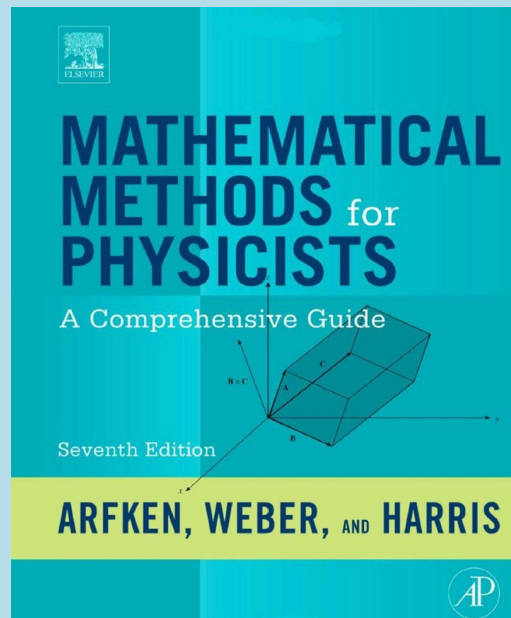
$$a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \cdots \rightarrow a_n$$

$a_{n+2} = 0$ 遞迴會停止。

其餘偶數次項係數都為零。

這樣多項式正是Hermite polynomials。

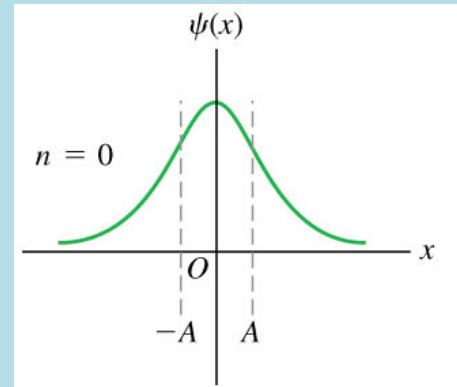
若 n 不是整數，遞迴不會停止，多項式是無限次，可證明所得的解會發散。



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

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

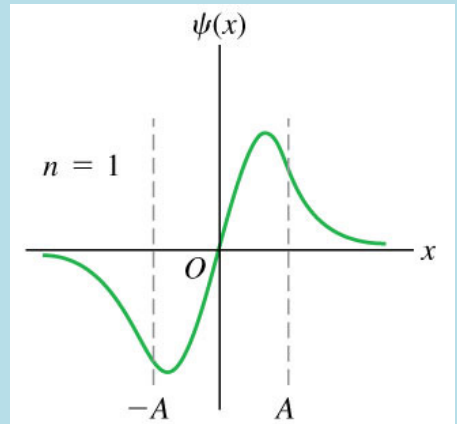
$$h_n(y) = \sum_{j=1}^n a_j y^j$$



前三個定態！

$$n = 0$$

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



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

Ground state

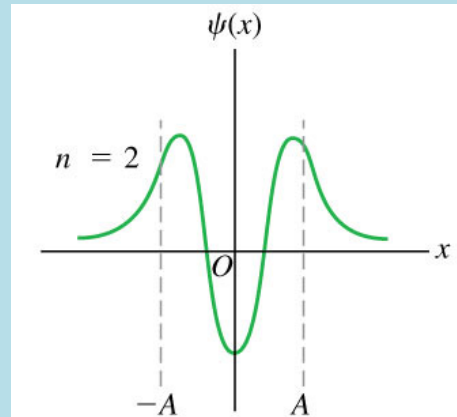
$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

常數則由歸一化條件給定：

$$n = 1$$

1st excited state

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

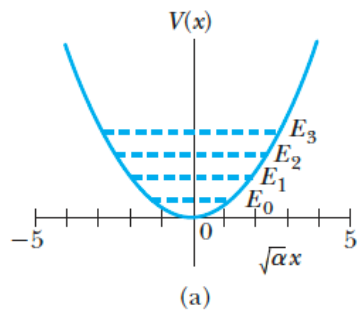


$$n = 2$$

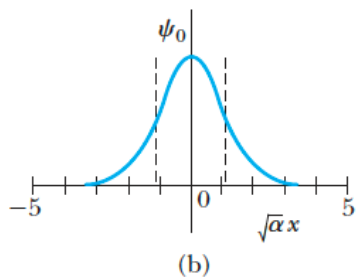
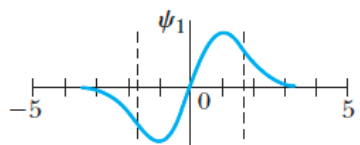
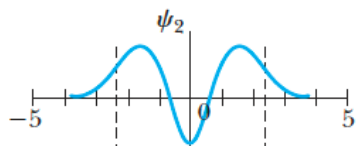
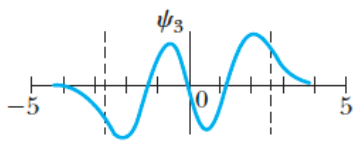
2nd excited state

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

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



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



Wave functions

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

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

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

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

能量量子化 Energy Quantization

別忘了！SHO的定態波函數滿足：

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

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

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

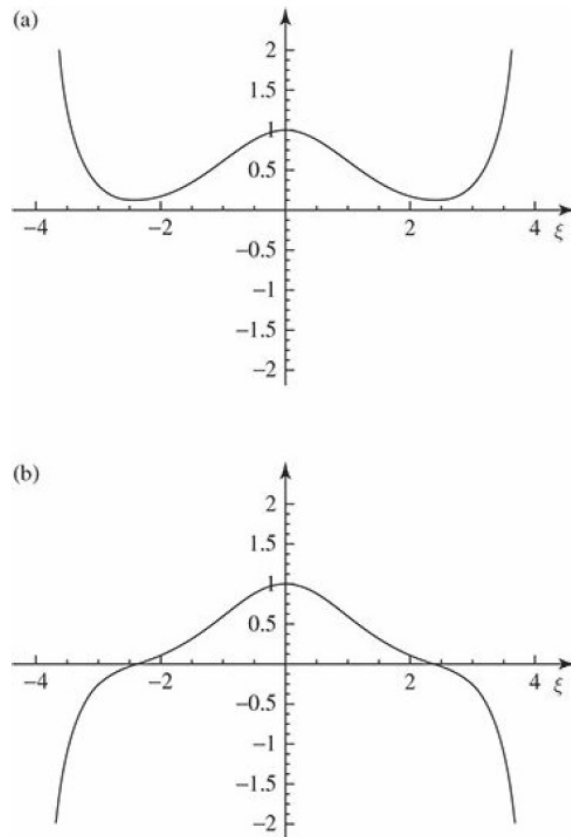
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_m(x)^* \cdot u_n(x) = \delta_{mn}$$

分量 c_n 可以寫成態函數與本徵函數的空間積分：

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

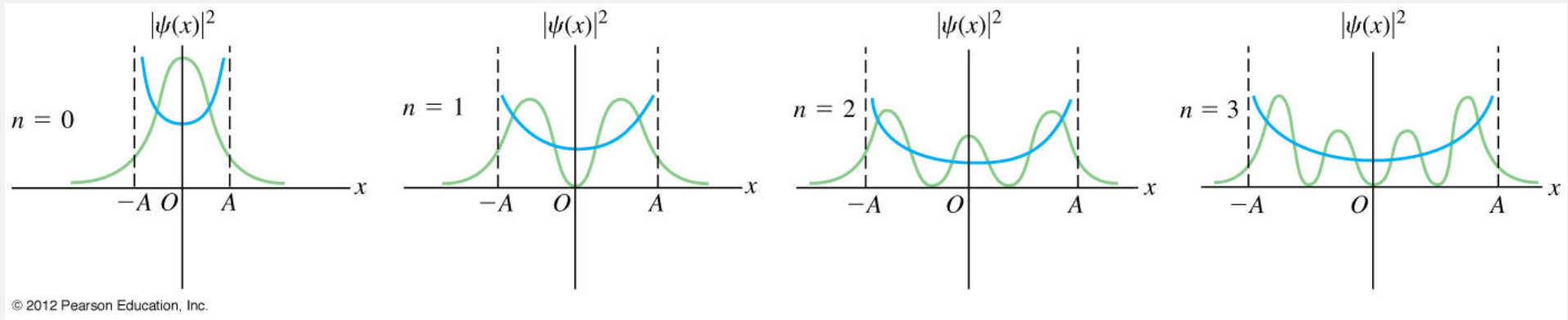
$|c_n|^2$ 就是在 $\psi(x)$ 狀態，測量能量時得到結果是 $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ 的機率！

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

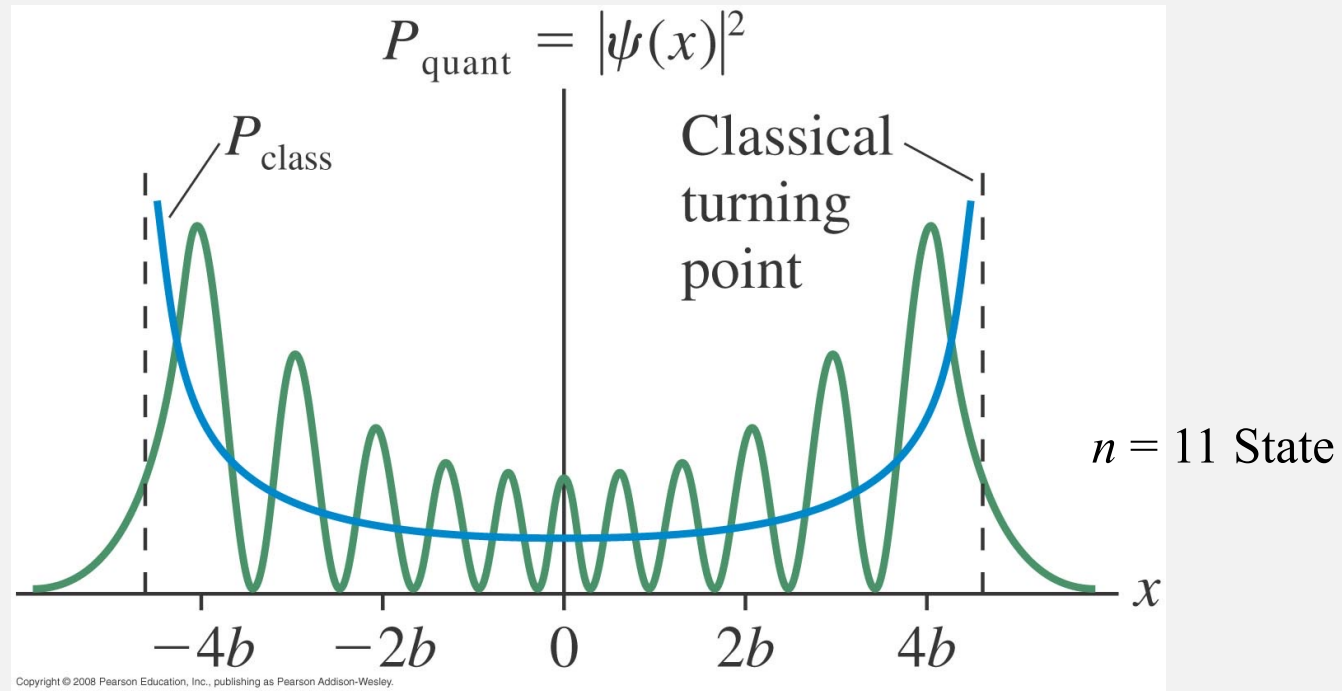


$$\frac{d^2\psi_E}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}kx^2 - E \right) \psi_E$$

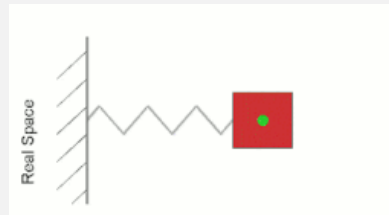
Figure 2.6: Solutions to the Schrödinger equation for (a) $E = 0.49\hbar\omega$, and (b) $E = 0.51\hbar\omega$.



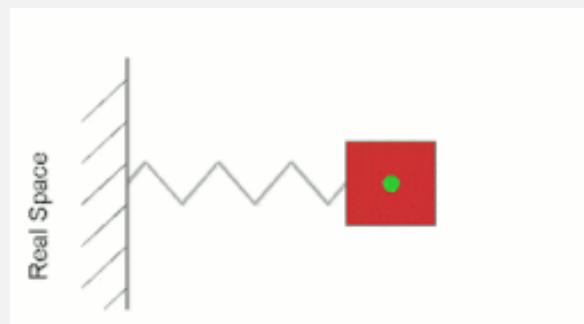
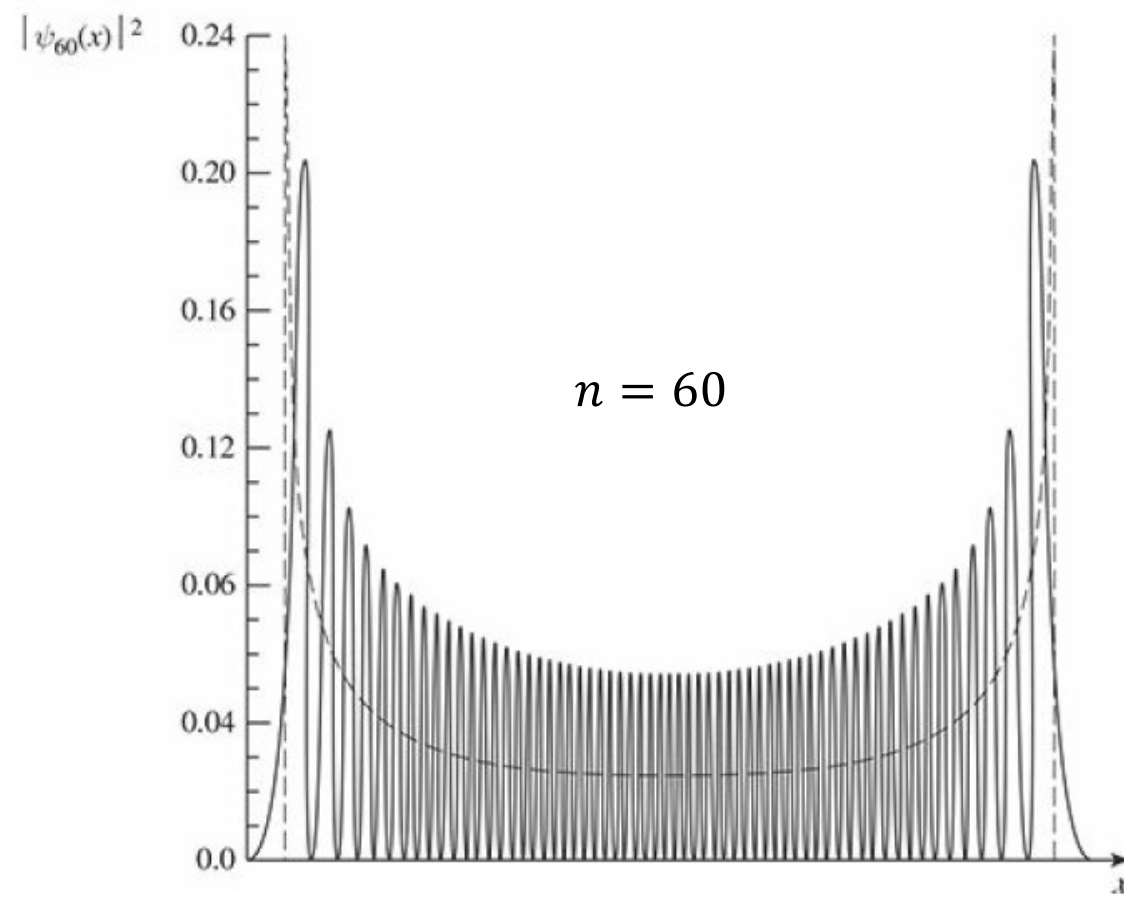
綠線是量子機率分佈，藍線是對應古典振動的位置機率，兩端運動慢，出現機率高。



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

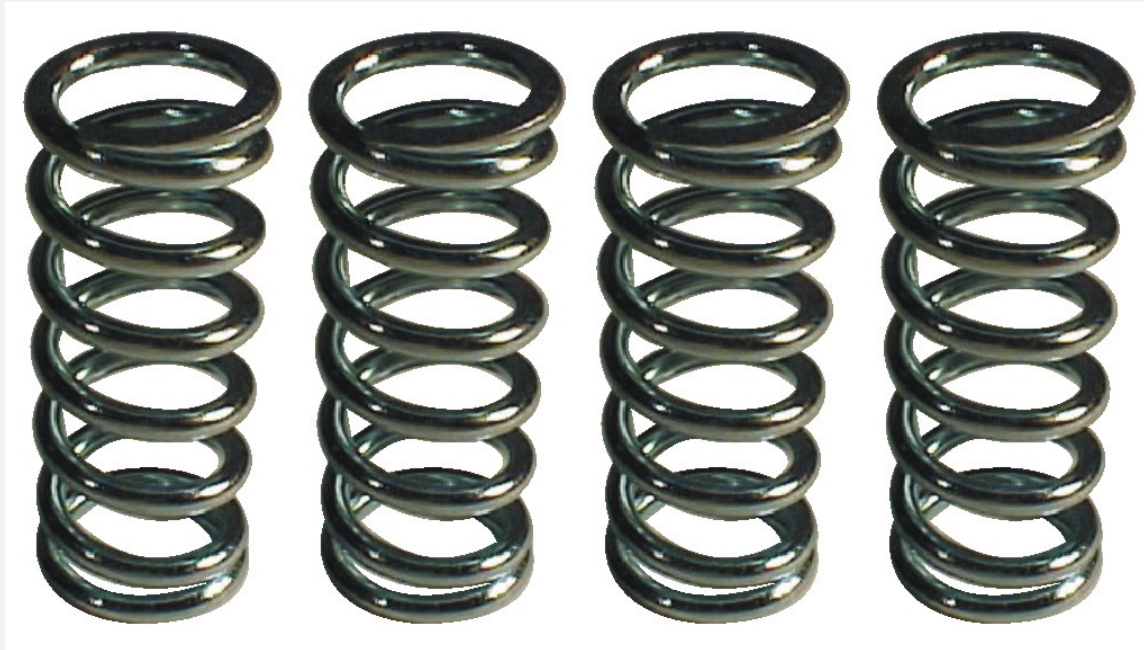


(b)

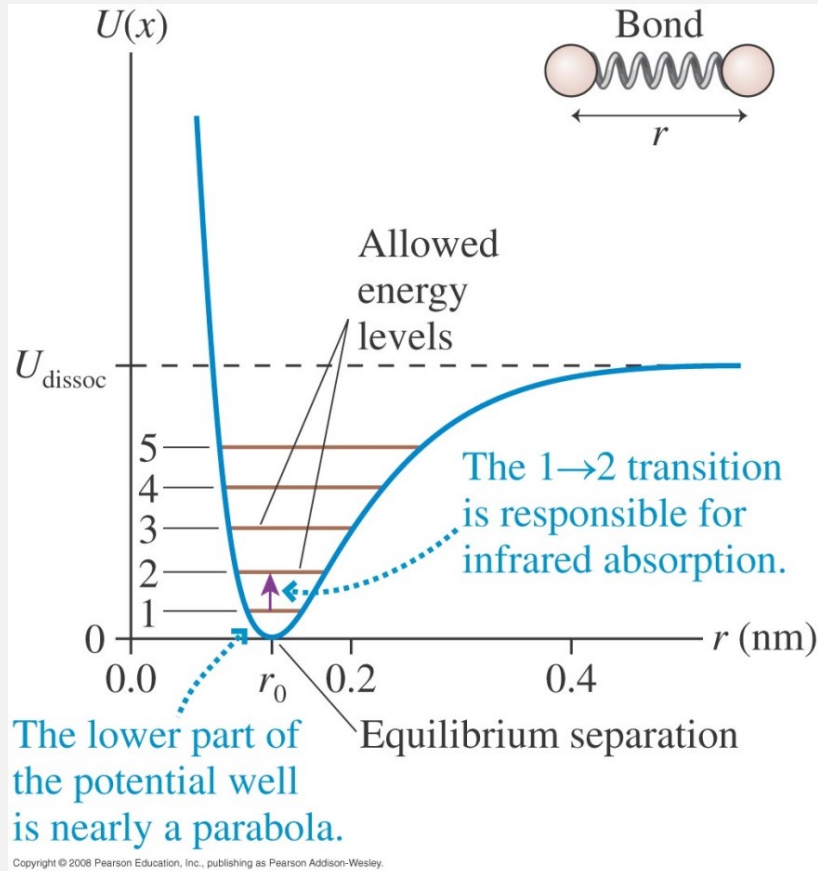


微觀世界有許多彈簧！

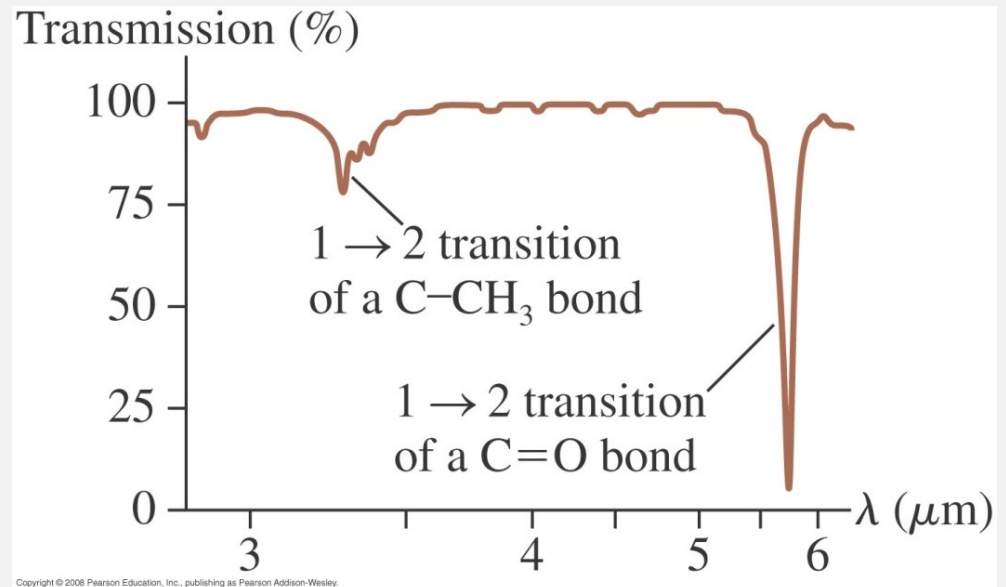
一個力學系統在平衡點附近的小範圍運動，都是簡諧運動！

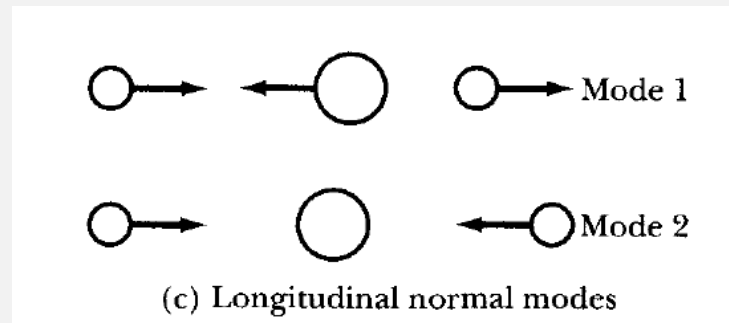
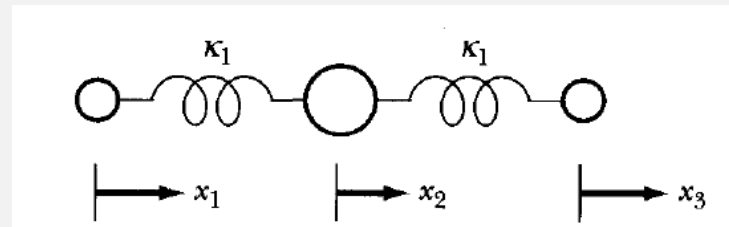
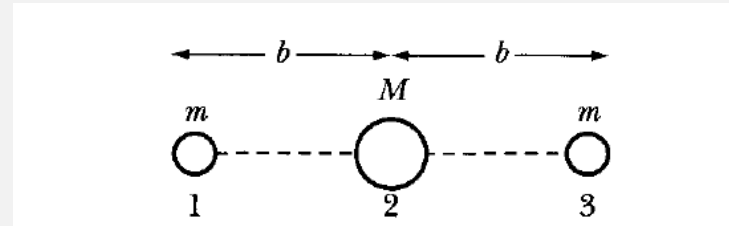


分子的束縛鍵就是一個彈簧！



Molecular Vibration 分子光譜

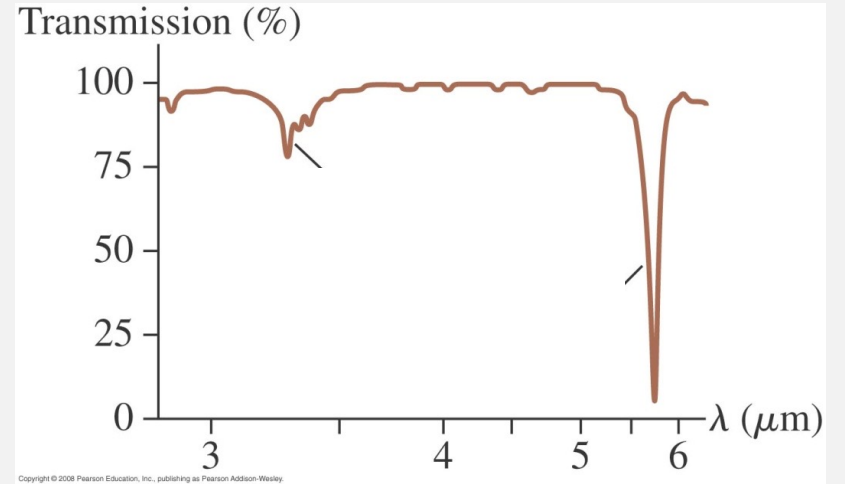
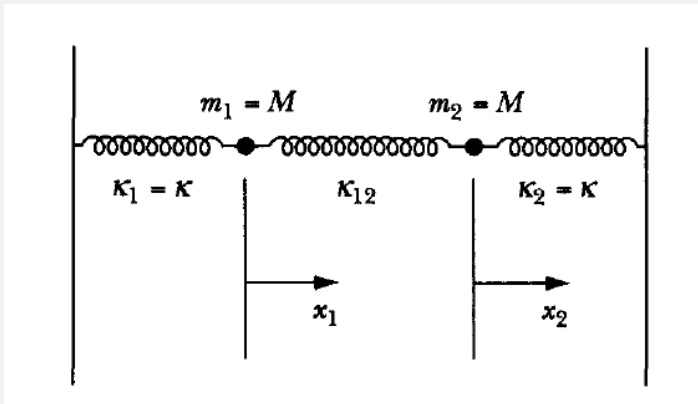
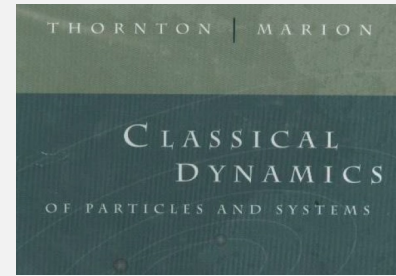




三個原子組成的分子，可以有兩個振盪模式Mode，如同兩條獨立振動的彈簧。

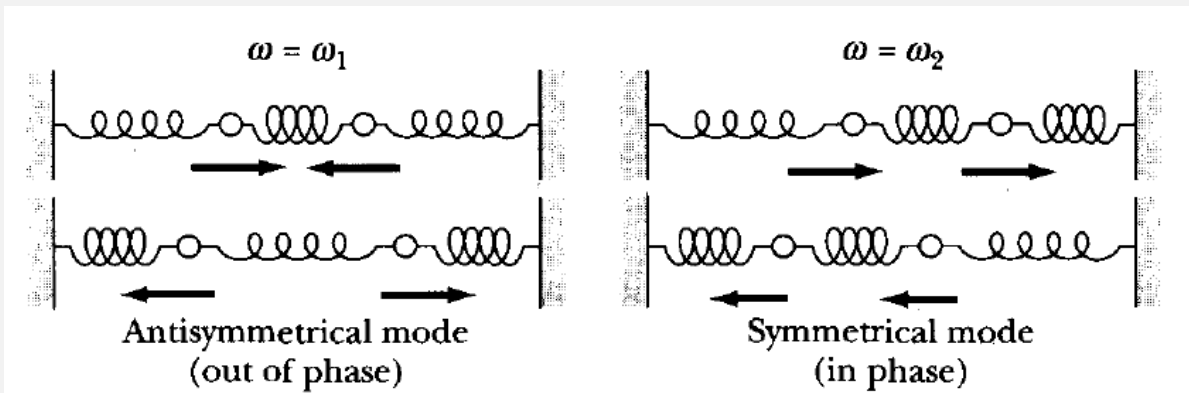
CHAPTER 12

Coupled Oscillations



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

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



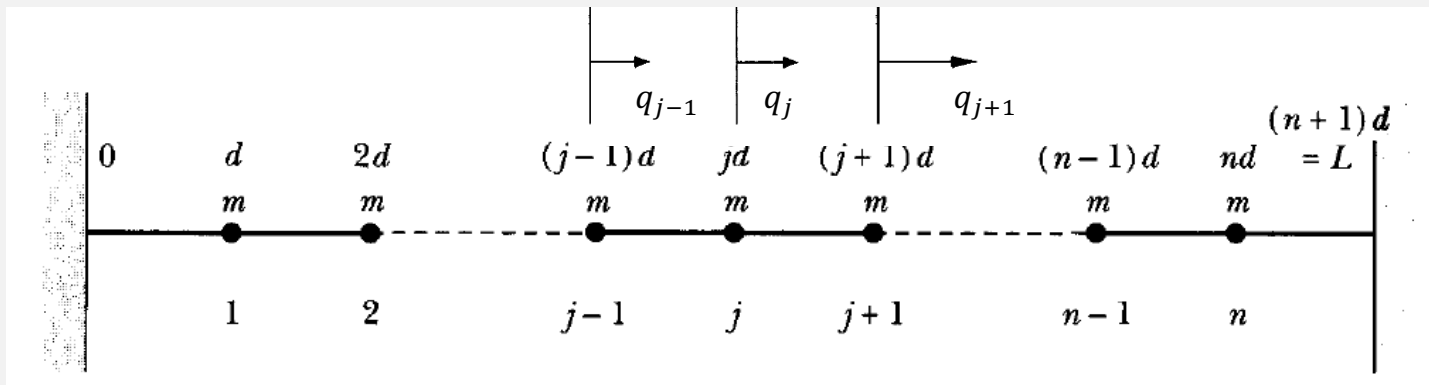
$$\omega_1 = \sqrt{\frac{\kappa + 2\kappa_{12}}{M}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{\kappa}{M}}$$

等於兩條獨立彈簧

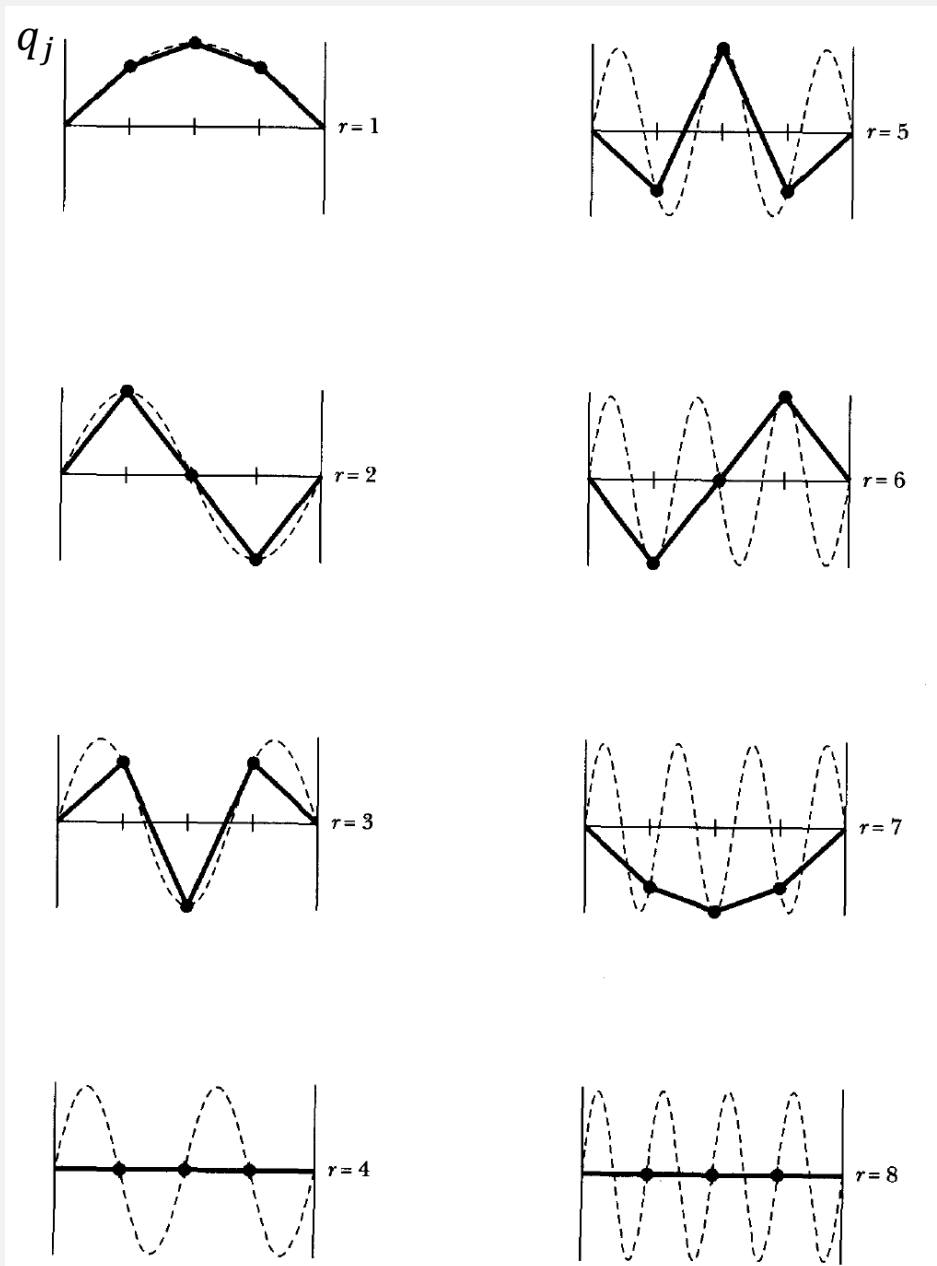
有2個mode。

每一個振動mode對應一條彈簧。

12.9 The Loaded String* 原子晶格的振動波



晶格上原子的前後移動，可以改寫成一個一個獨立的振動模式mode。



每一個振動mode對應一條獨立彈簧。

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

在第 r 個mode，第 j 個粒子的振幅可以寫成：

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

很像駐波。

重新定義變數： x 為第 j 個粒子的位置。

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

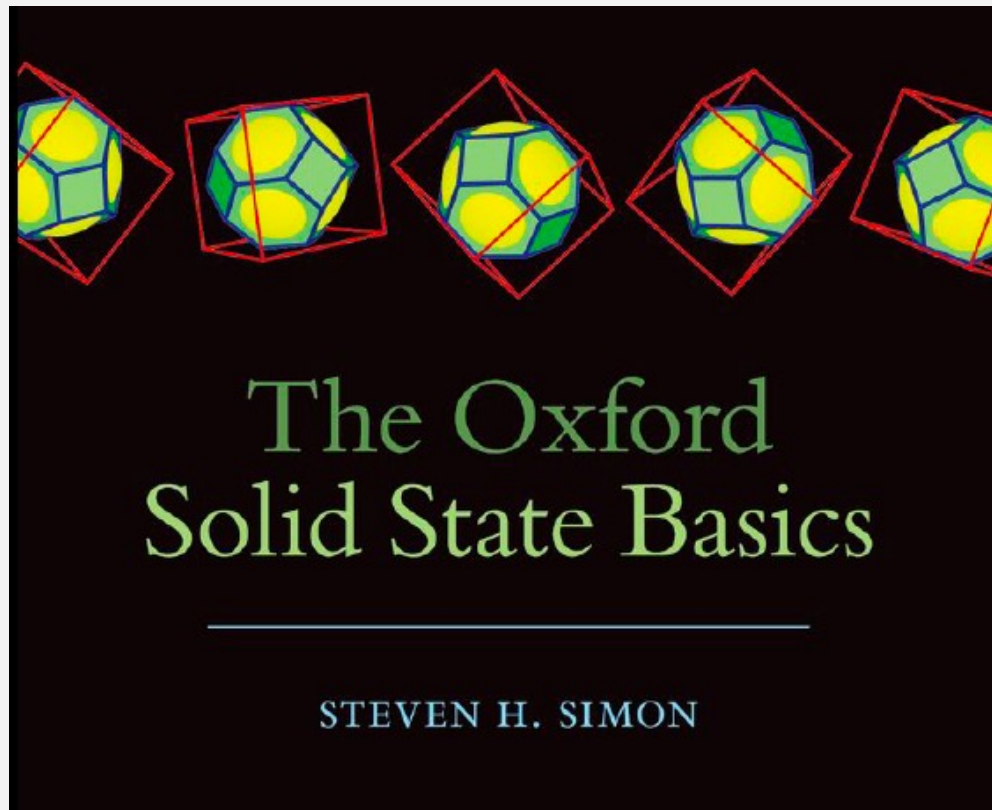
以上可以改寫成：

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

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

每一角波數 k 模式對應一條彈簧！





Vibrations of a One-Dimensional Monatomic Chain

9

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

n 很大時， k 就成為連續變數。其實這就是角波數。
 模式 k 時，在位置 x 的粒子的運動可以解出：

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

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

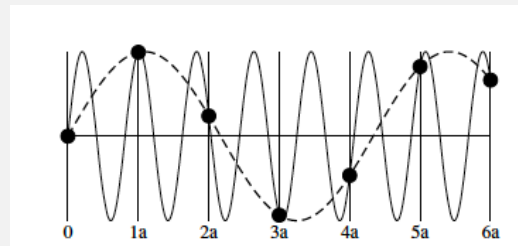
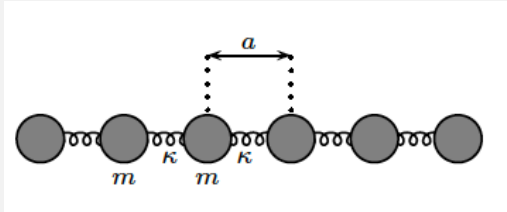
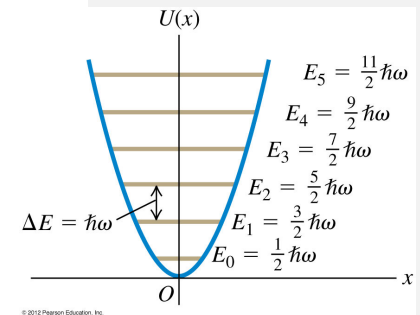
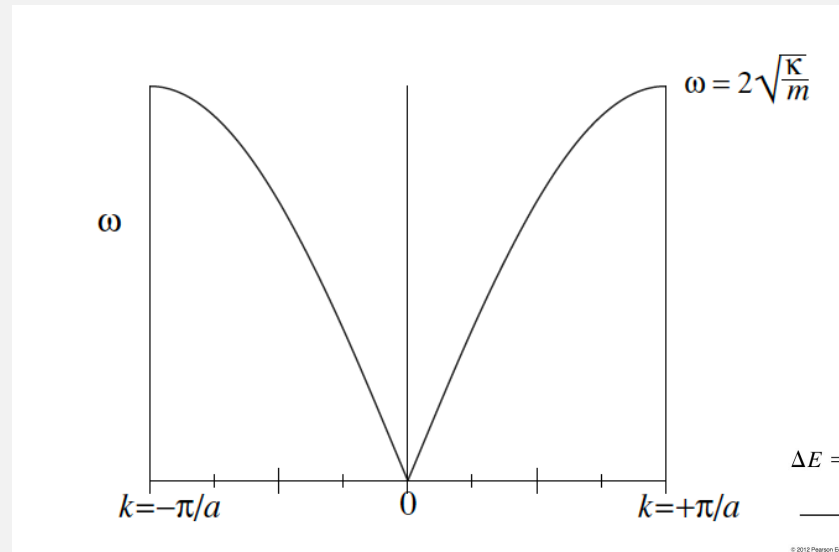


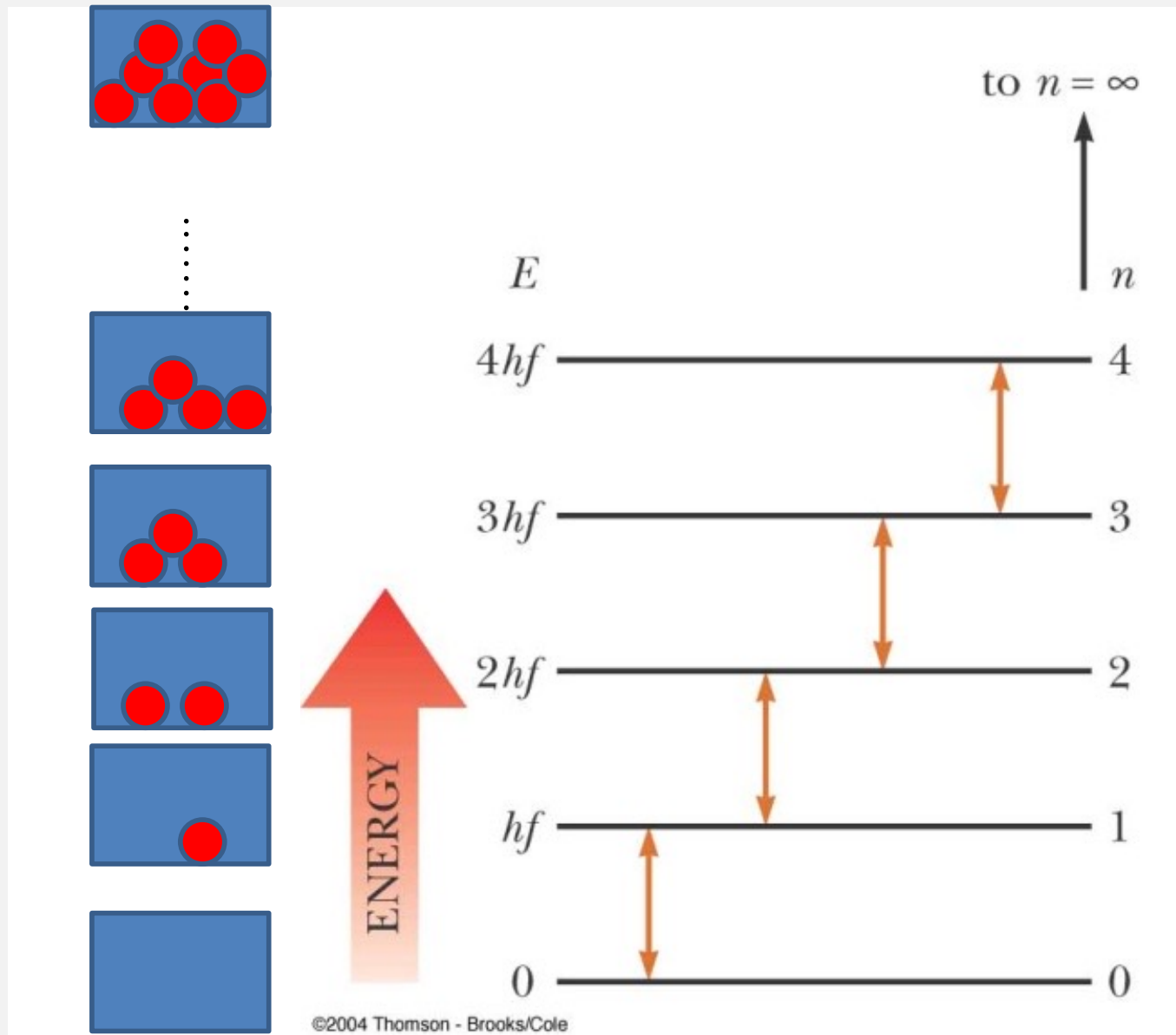
Fig. 9.3 Aliasing of waves. The dashed curve has wavevector k whereas the solid curve has wavevector $k + 2\pi/a$. These two waves have the same value (solid dots) at the location of the lattice points $x_n = na$, but disagree between lattice points. If the physical wave is only defined at these lattice 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 \rightarrow 粒子 粒子數 $n = \frac{E}{\hbar\omega(k)}$

這就稱為聲子 phonon：量子彈簧的激發態！



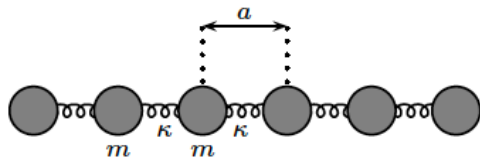


Fig. 9.1 The one-dimensional monatomic harmonic chain. Each ball has mass m and each spring has spring constant κ . The lattice constant, or spacing between successive masses at rest, is a .

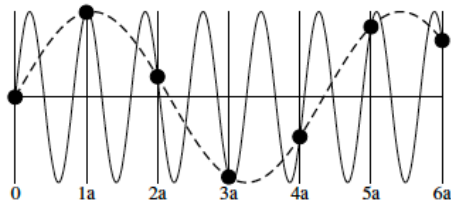
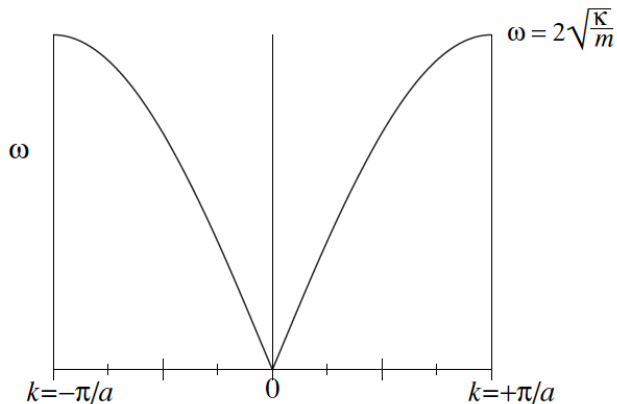


Fig. 9.3 Aliasing of waves. The dashed curve has wavevector k whereas the solid curve has wavevector $k + 2\pi/a$. These two waves have the same value (solid dots) at the location of the lattice



9.3 Quantum Modes: Phonons

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

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

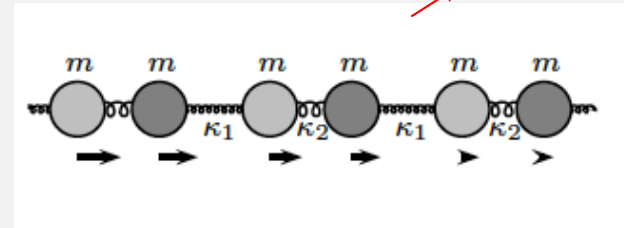
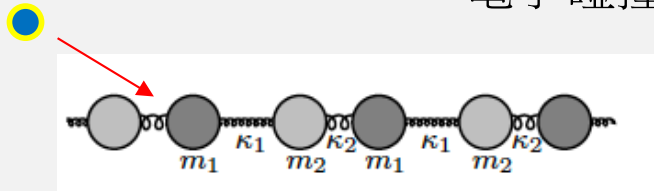
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (9.7)$$

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

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

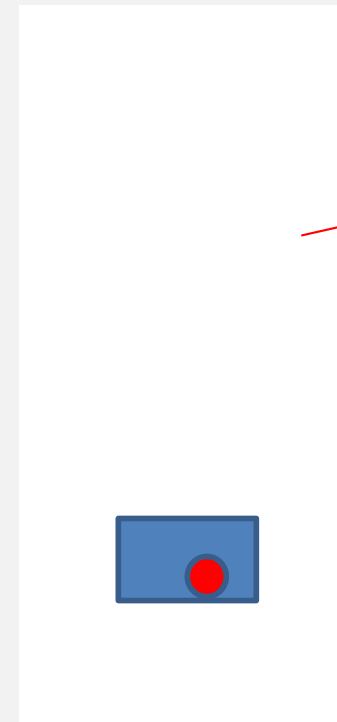
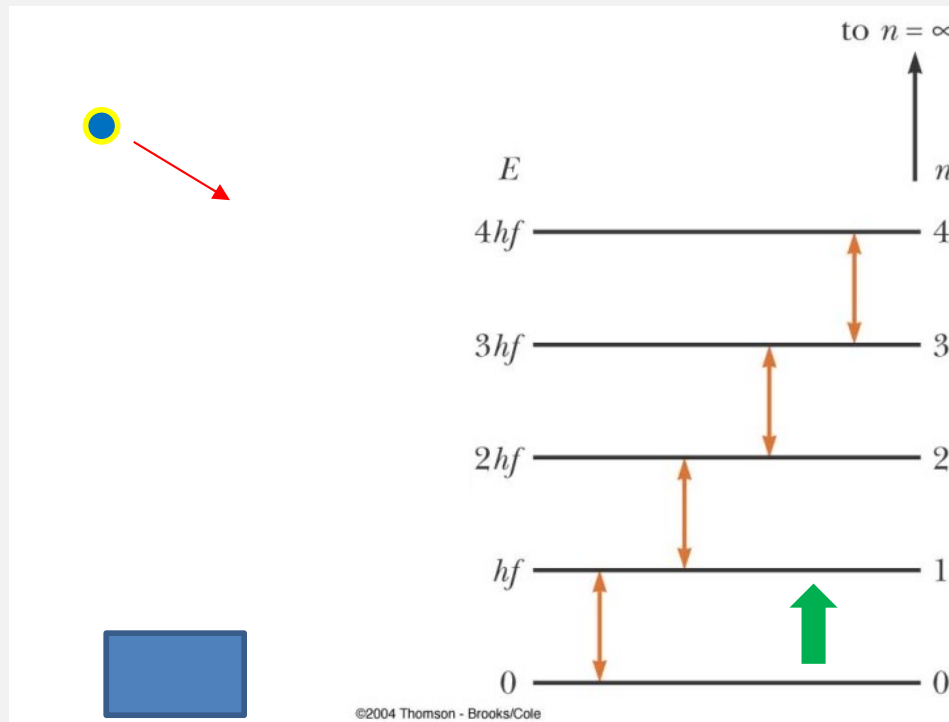
This is entirely analogous to defining a single quantum of light as a photon. As is the case with the photon, we may think of the phonon as actually being a particle, or we can think of the phonon as being a quantized wave.

電子碰撞晶體中的原子鏈

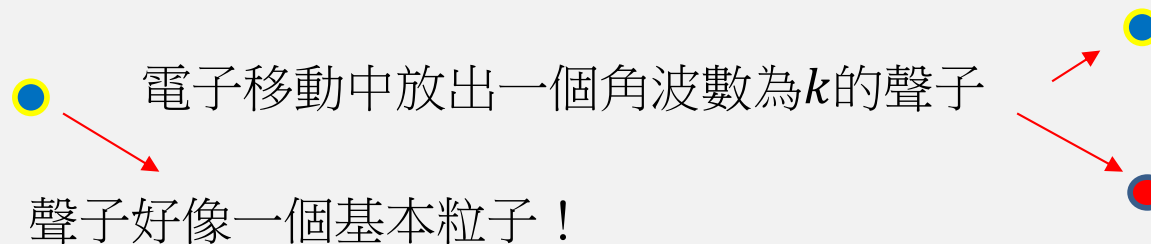


等同

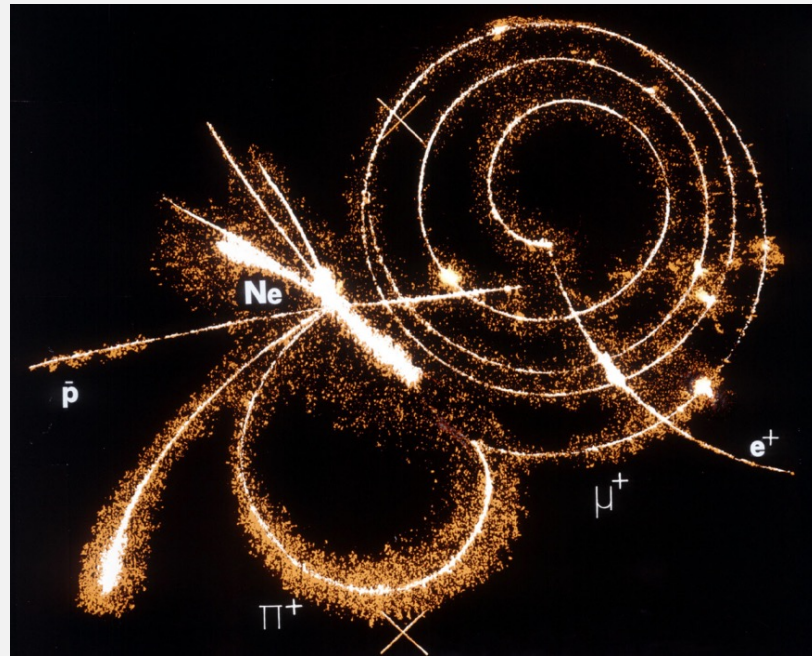
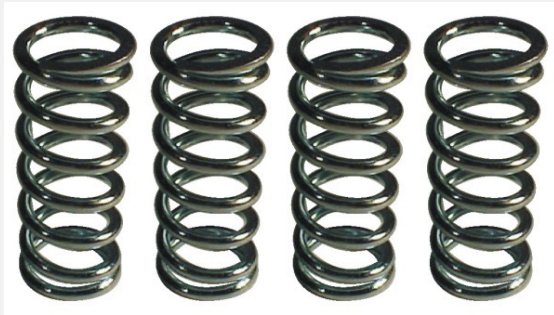
電子碰撞激發某個模式 k 由 $n = 1$ 定態躍遷到 $n = 2$ 定態。



等同



量子彈簧不是彈簧，而是可以產生、可以消滅的粒子的系統。

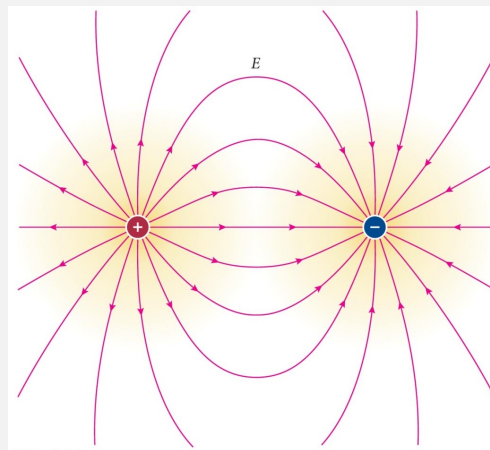


那基本粒子如電子，可不可能看成聲子呢？

基本粒子如電子，可不可能看成是量子彈簧的激發態呢？

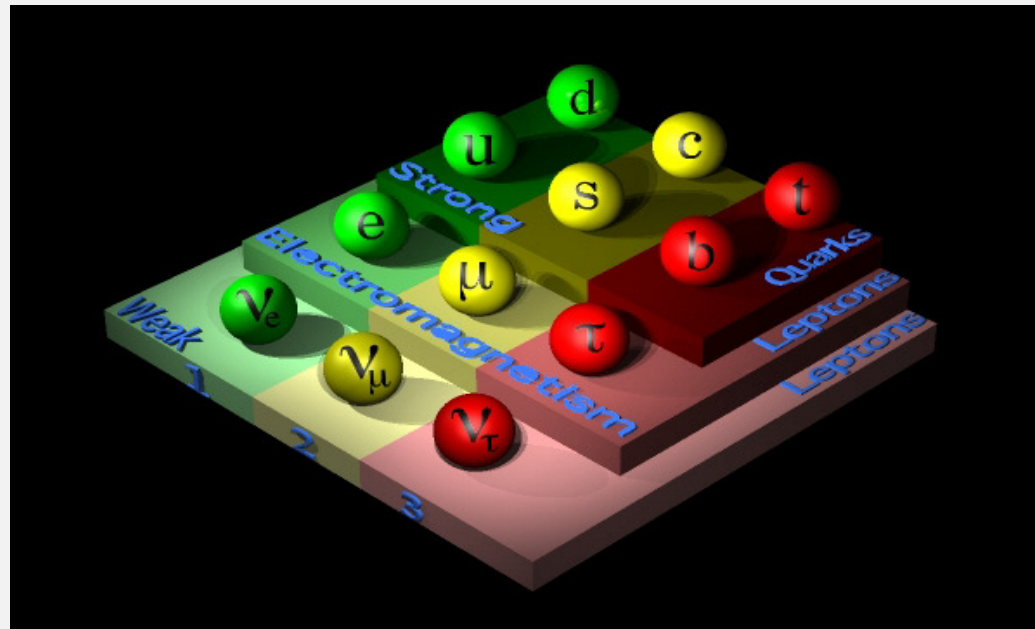
當然這時的彈簧就不能是原子的晶格。

但我們早已熟悉、真空中場的擾動，也可看成一個一個的彈簧的組合！

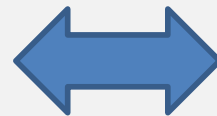


如果場也量子化了，這就稱為量子場，激發態就會是一個個基本粒子。

每一個基本粒子都對應一個量子場



電子



電子場

u 夸克

u 夸克場

描述可產生可消滅的粒子的理論：量子場論！

我們的宇宙是由彈簧組成的

