

4. One of the first Schrodinger Wave Equations to be written down and solved is that of an electron in the simple harmonic potential  $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 x^2$ :

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

$\alpha$  is actually  $\frac{m\omega}{\hbar} = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$ . But calculation would be easier to keep  $\alpha$  as above.  $\hbar$  is the Planck Constant  $h$  divided by  $2\pi$ . Here  $\Psi(x, t)$  is the famous wave function. As you can see from the equation, the left-hand side contains an  $i$  and hence the wavefunction

must be complex valued. It is reasonable to think that there exist solutions that are separable just like in the classical wave equation we discussed in class:

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

- A. Find the Ordinary Differential Equation satisfied by  $\psi(x)$  and  $\phi(t)$ . Show that:

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

is the solution for  $\phi(t)$ .  $E$  is a constant to be determined.

Sol: 方程式與空間有關的運算，稱算子，及與時間有關運算是分開的。

A. 將 $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$ 代入波方程式：

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

對空間運算， $\phi(t)$ 如同一個常數，反之亦然。

左右都除以  $\psi(x) \cdot \phi(t)$ ：

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

唯一可能是左右兩式與兩個變數都無關，是一常數。設為 $E$ 。

在左邊只與 $x$ 有關，右邊只與 $t$ 有關，兩者是獨立變數！

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

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

這樣得到的稱為定態解Stationary State。

以上適用於任何位能 $V(x)$ ！

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

若 $E = \hbar\omega$ ， $\phi(t) = e^{i\omega t}$

如同簡諧運動

以上適用於任何位能 $V(x)$ ！

薛丁格波的系統如同古典波，

它有一系列如同簡諧運動的模式解，在這裡通常稱定態解。

當然我們也可以要求位能 $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 x^2$ 就是彈力位能，

這樣的電子波就叫量子簡諧振盪器，或簡稱量子彈簧！

B.  $\psi(x)$  would have solutions for a discrete set of infinite number of positive values of  $E$ . Prove that  $e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}$  is a solution for  $\psi(x)$ . Write down the corresponding  $E$  (this is the smallest  $E$  and  $E$  corresponds to energy. All the other solutions have larger  $E$  and  $e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}$  is the ground state) and  $\phi(t)$  in terms of  $\alpha, m, \hbar$ .

B. 空間部分  $\psi(x)$  滿足：

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

也就是：

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

代入  $\psi(x) = e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}$  這是常微分方程式，也是本徵值方程式，  
專業：Sturm-Liouville eigenfunction problem

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

$$\alpha e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} - (\alpha x)^2 e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} + \alpha^2 x^2 e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} = \alpha e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} = \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi$$

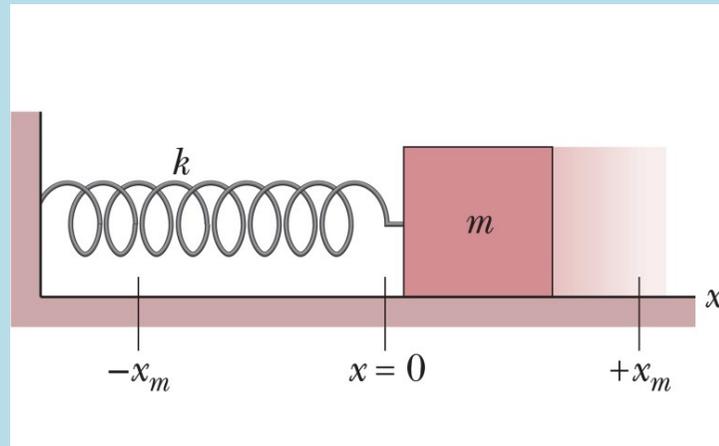
If  $E = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha$ ,  $e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}$  is a solution. The whole solution:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t) = e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

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

# 前情提要

## 簡諧運動的運動方程式



$$F = -kx$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0$$

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

簡諧振盪器，以複數方法求解：

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0$$

首先將這個式子裡的  $x$  推廣為一個複數  $z$ 。

$$\frac{d^2z}{dt^2} + \omega^2z = 0$$

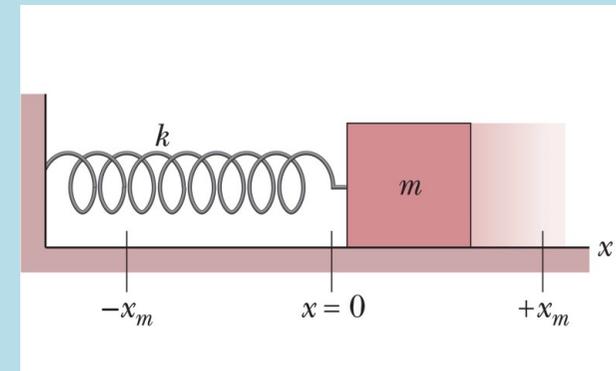
注意複數  $z$  包含實數部  $\text{Re } z$  與虛數部  $\text{Im } z$ 。

$$\frac{d^2(\text{Re } z + i\text{Im } z)}{dt^2} + \omega^2(\text{Re } z + i\text{Im } z) = 0 + i0$$

因為方程式是線性的， $z$  的實數部與虛數部也同時滿足原來  $x$  滿足的方程式！  
如果能解出複數  $z$ ，再取其實數部或虛數部，即可得到原方程式的實數解  $x$ 。

$$\frac{d^2(\text{Re } z)}{dt^2} + \omega^2(\text{Re } z) = 0$$

$$\frac{d^2(\text{Im } z)}{dt^2} + \omega^2(\text{Im } z) = 0$$



$$\frac{d^2z}{dt^2} + \omega^2z = 0$$

如果我們大膽地猜，解正比於一個複數指數函數：

$$z = z_0 e^{\alpha t}$$

上式所有項都正比於 $z$ ：

微分的次數對應 $\alpha$ 的幕次。

$$\frac{d^n}{dt^n} z = \alpha^n z$$



$$\alpha^2 z + \omega^2 z = 0$$



$$\alpha^2 + \omega^2 = 0$$

原來的微分方程式現在一項對一項地轉化為未知的 $\alpha$ 滿足之代數方程式。

$\alpha$  可被解出：

$$\alpha_{\pm} = \pm i\omega$$

解出複數解 $z$ ：

$$z_{\pm} = z_0 e^{\pm i\omega t}$$

$$z_{\pm} = z_0 e^{\pm i\omega t}$$

$z_0$  是一個複數常數，因此可以寫成：

$$z_0 = A e^{i\phi} \quad A, \phi \text{ 是兩個實數常數。}$$

$$z_+ = A e^{i(\omega t + \phi)} = A \cos(\omega t + \phi) + iA \sin(\omega t + \phi)$$

這就是簡諧運動的複數解！

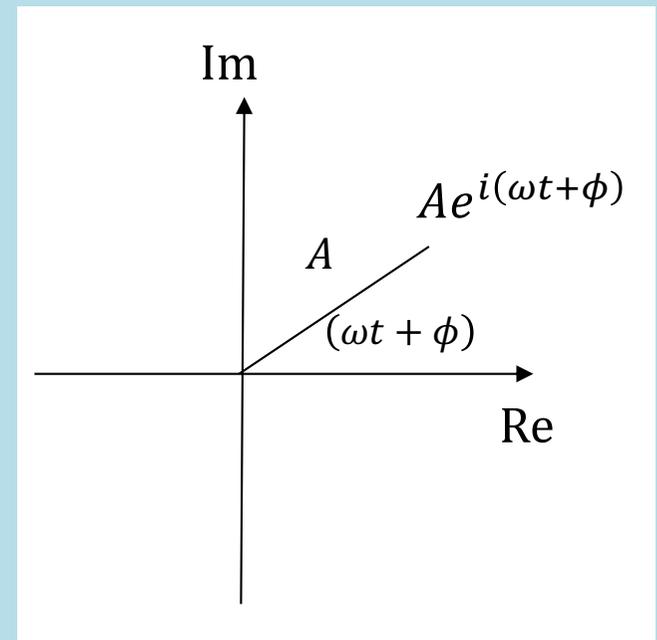
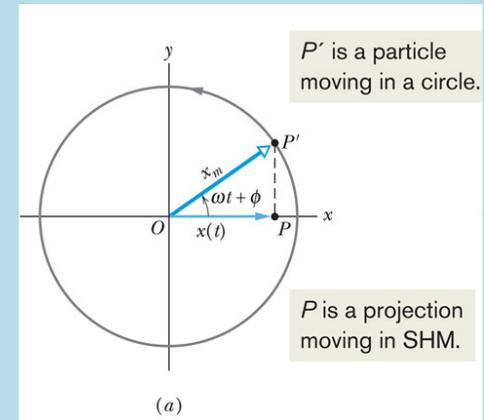
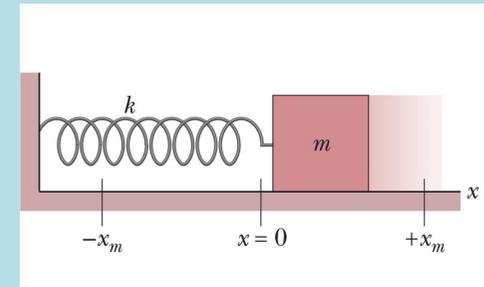
假想圓就是此複數解  $A e^{i(\omega t + \phi)}$  在其複數平面上的表現！

取其實數部，就得到簡諧運動的實數解！

$$A \cos(\omega t + \phi) = \text{Re}[A e^{i(\omega t + \phi)}]$$

這個解有兩個未定常數，因此就是最普遍的解了。

$$A e^{i(\omega t + \phi)} \quad \text{簡諧運動！}$$



那 $z_+$ 的虛數部及 $z_-$ 呢？：

$$A \sin(\omega t + \phi) = \text{Im}[Ae^{i(\omega t + \phi)}] = A \cos\left(\omega t + \phi - \frac{\pi}{2}\right)$$

$z_+$ 的虛數部及 $z_+$ 的實數部等價。

同理 $z_-$ 的實數部及虛數部也與 $z_+$ 的實數部等價。

$$A \cos(-\omega t + \phi) = A \cos(\omega t - \phi)$$

$$A \sin(-\omega t + \phi) = -A \sin(\omega t - \phi) = -A \cos\left(\omega t - \phi - \frac{\pi}{2}\right)$$

$z = z_0 e^{i\omega t}$  就足夠了。

Sol: 方程式與空間有關的運算，稱算子，及與時間有關運算是分開的。

A. 將 $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$ 代入波方程式：

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

對空間運算， $\phi(t)$ 如同一個常數，反之亦然。

左右都除以  $\psi(x) \cdot \phi(t)$ ：

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

唯一可能是左右兩式與兩個變數都無關，是一常數。設為 $E$ 。

在左邊只與 $x$ 有關，右邊只與 $t$ 有關，兩者是獨立變數！

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

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

這樣得到的稱為定態解Stationary State。

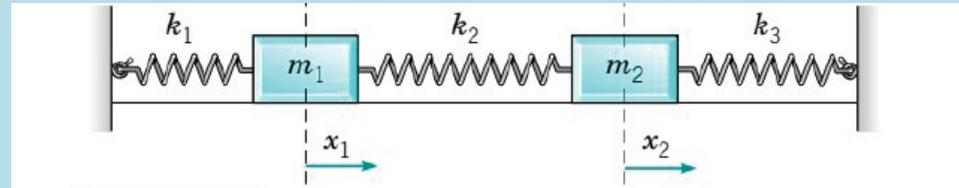
以上適用於任何位能 $V(x)$ ！

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

若 $E = \hbar\omega$ ， $\phi(t) = e^{i\omega t}$

如同簡諧運動

## 耦合振盪 coupled oscillation



$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} = -\frac{2k}{m} x_1 + \frac{k}{m} x_2$$

$$\frac{d^2 x_2}{dt^2} = \frac{k}{m} x_1 - \frac{2k}{m} x_2$$



$$\begin{pmatrix} \frac{d^2 x_1}{dt^2} \\ \frac{d^2 x_2}{dt^2} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2\omega_0^2 & -\omega_0^2 \\ -\omega_0^2 & 2\omega_0^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

行向量

$$\mathbf{x} \equiv \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

矩陣

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} 2\omega_0^2 & -\omega_0^2 \\ -\omega_0^2 & 2\omega_0^2 \end{pmatrix}$$

$$\omega_0 \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x} = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

$$-A \cdot \mathbf{x} = \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x}$$

假設行向量解也可以寫成複數指數函數：

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} e^{i\omega t}$$

$$\mathbf{a} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

微分方程組被轉化為矩陣**A**的本徵值 $\omega$ 問題，**a**稱為本徵向量。

$$A \cdot \mathbf{a} = \omega^2 \mathbf{a}$$

本徵值 $\omega^2$ 有兩個實數，各自對應一本徵向量**a**。

$$\omega_1 \equiv \omega_0$$

$$\mathbf{a}^{(1)} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{a}^{(1)} e^{i\omega_1 t}$$

$$\omega_2 \equiv \sqrt{3}\omega_0$$

$$\mathbf{a}^{(2)} = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{a}^{(2)} e^{i\omega_2 t}$$

一個本徵向量就對應一個解，一個可獨立振盪的模式。模式解Mode。



先設 $x_i$ 為複數，如下猜解並代入：

$$\mathbf{X} = \mathbf{a}e^{i\omega t}$$

$$\frac{d^2\mathbf{X}}{dt^2} = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{X}$$



$$-\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = -\omega^2 \mathbf{a}$$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_j \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

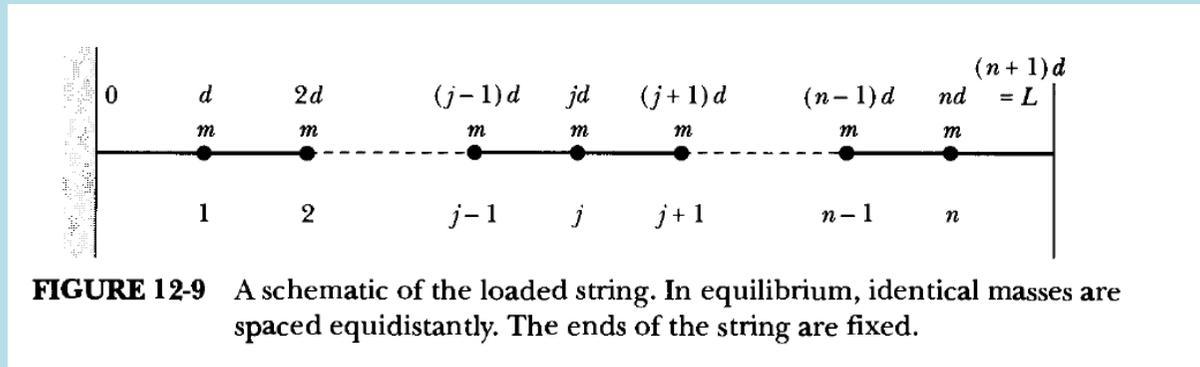
微分方程組被轉化為 $N \times N$ 矩陣的本徵值問題。

$$-\omega_0^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_j \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = -\omega^2 \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_j \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

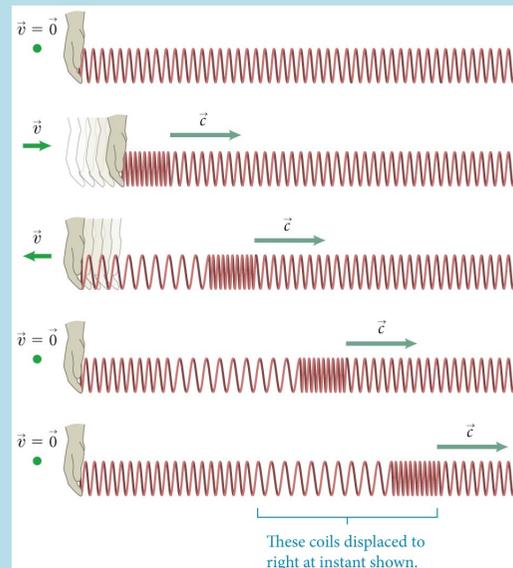
實數本徵值有 $N$ 個，實數本徵向量也有 $N$ 個。此系統有 $N$ 個模式解。

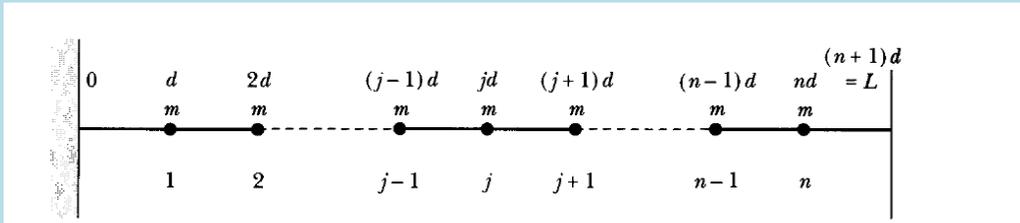
## Continuum limit

$$m \frac{d^2 x_j}{dt^2} = -k(x_j - x_{j-1}) + k(x_{j+1} - x_j)$$



Wave





$$m \frac{d^2 x_j}{dt^2} = +k(x_{j+1} - x_j) - k(x_j - x_{j-1})$$

當粒子數量太龐大，用行向量就不是那麼方便，反而用函數  $\phi(x)$  來描述更好。

$\phi(dj) \equiv x_j$   $\phi(dj)$  就是第  $j$  個粒子的位移。

但當  $N \rightarrow \infty, d \rightarrow 0$ ，有粒子處的位置就几乎是連續的變數：

$$dj \rightarrow x$$

$\phi(dj) \rightarrow \phi(x)$   $\phi(x)$  真的成為  $x$  的函數，而且  $\phi(x, t)$  是雙變數函數。稱為波函數。

$$m \frac{d^2 \phi(dj)}{dt^2} = +k(\phi(dj + d) - \phi(dj)) - k(\phi(dj) - \phi(dj - d))$$

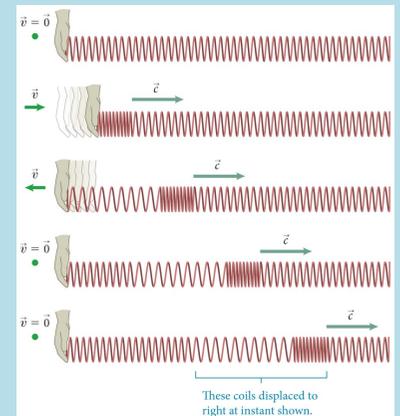
$$= +kd \frac{\phi(dj + d) - \phi(dj)}{d} - kd \frac{\phi(dj) - \phi(dj - d)}{d}$$

$$\rightarrow kd \left[ \frac{d\phi}{dx}(dj) - \frac{d\phi}{dx}(dj - d) \right]$$

$$\rightarrow kd^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2}(dj) \quad \rightarrow \quad \frac{d^2 \phi}{dt^2}(x, t) = \frac{kd^2}{m} \frac{d^2 \phi}{dx^2}(x, t)$$

微分應是偏微分。

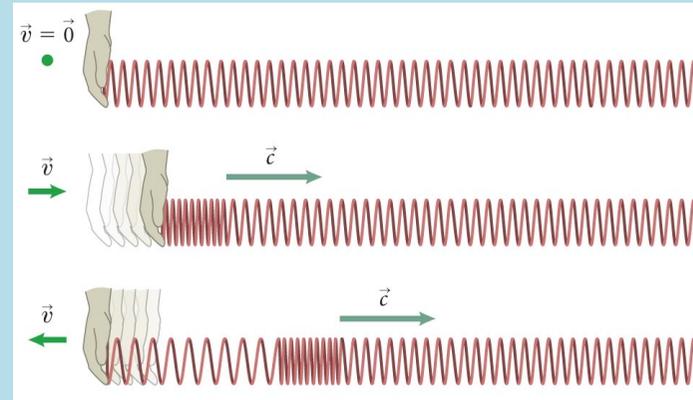
$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}(x, t) = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, t)$$



$$v = \sqrt{\frac{kd}{m/d}} \equiv \sqrt{\frac{\tau}{\mu}}$$

## 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：

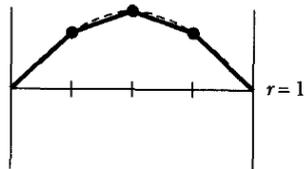
$$\phi(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt)$$



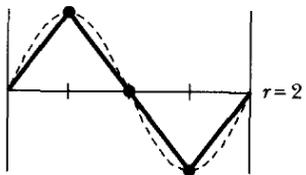


若介質大小有限，連續介質就如大數目的彈簧組，有一系列模式振動。

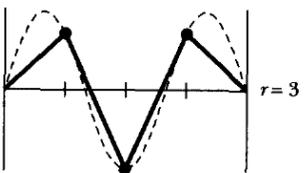
彈簧組運動：一個本徵向量就對應一個可獨立振盪的模式。



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



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



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

Solving Wave Equation:

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

求解策略：

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**：

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

時間部分 $T$ ，如同簡諧運動的方程式，很快可以解出：

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

$$T(t) = T_0 e^{i\omega t}, \text{ or } \text{Re}[A e^{i(\omega t + \phi)}]$$

$$\phi(x, t) = T_0 X(x) \cdot e^{i\omega t}$$

許多推導會直接假設以上式為解的形式，

這就非常類似耦合彈簧的模式解mode： $X = a e^{i\omega t}$

**振盪模式解mode**就與這個**facto**直接相聯： $e^{i\omega t}$

變數分解解法得到的可以說就是波系統的模式解！

空間部分 $X$ 也滿足自己的常微分方程式：

$$\frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda X$$

## 耦合彈簧與波動系統的對照表

$$\frac{d^2 X}{dt^2} = -A \cdot X$$

$$-A \cdot X$$

$$A$$

$$X = \text{Re } a e^{i\omega t} = a a_m \cos(\omega t + \phi)$$

$$a$$

矩陣的本徵值方程式！  $-A \cdot a = \lambda a$

$$a_j \sim e^{-ipj} \text{ or 虛數部 } \sin pj$$

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

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi$$

$\frac{d^2}{dx^2}$  微分運算稱為算子operator

$$\phi(x, t) = X(x) \cdot A e^{i(\omega t + \phi)}$$

$$X(x)$$

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

$$X(x) \sim \sin kx$$

$X(x)$  就稱為微分算子 Differential Operator  $\frac{d^2}{dx^2}$  的本徵函數！

可分解波函數就對應模式的位移行向量， $\sin(k_n x)$  就對應本徵向量！

在波的現象中的算子operator，根源事實上是矩陣matrix。

算子operator的本徵值，與矩陣matrix的本徵值一樣將扮演重要角色。

空間部分 $X$ 也滿足自己的常微分方程式：

$$\frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda X$$

要求滿足邊界條件，如此 $X_i(x), i = 1, \dots, \infty$  會是一系列可數的函數。

常數 $\lambda$ 如同耦合彈簧的本徵值，也是可數，可以標記： $\lambda_i, i = 1, \dots, \infty$ 。

時間部分 $T$ 就會是對應的 $T_i(t)$ 。

$$\phi_i(x, t) = X_i(x) \cdot T_i(t) = A_i X_i(x) e^{i(\omega_i t + \phi_i)}$$

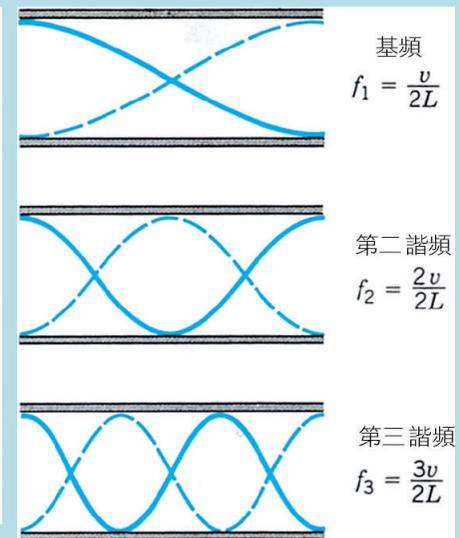
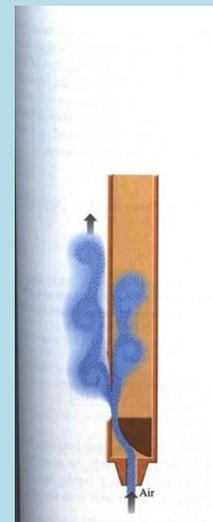
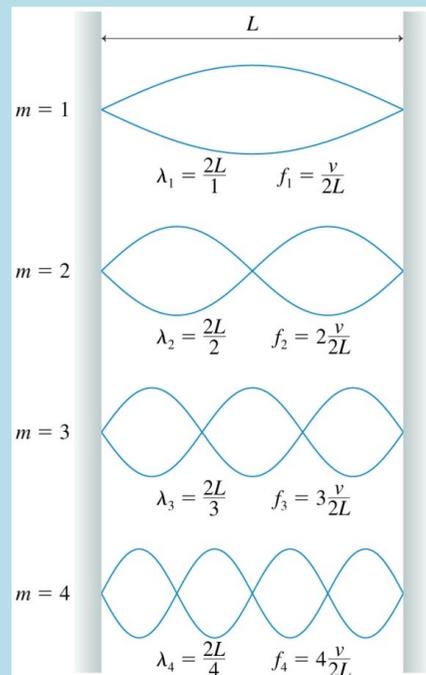


圖 17.6

開放管中前三種共振模。

Solving Wave Equation:

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

求解策略：

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**：

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

要求滿足邊界條件，如此 $X_i(x), i = 1, \dots, \infty$  會是一系列可數的函數。

$$\phi_i(x, t) = X_i(x) \cdot T_i(t)$$

關鍵：波方程式是線性方程式， $X_i(x)T_i(t)$ 作線性組合，還是波方程式的解。

將 $t = 0$ 的起始條件分解為 $X_i(x)T_i(0)$ 的線性組合無窮級數，可證這永遠能作到。

$$\phi(x, 0) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot X_i(x)T_i(0)$$

$X_i(x)$ 可以分解任意起始條件這個性質非常關鍵， $X_i(x)$ 稱為具有完備性！

讓組合中的 $X_i(x)$ 各自依照對應的 $T_i(t)$ 作時間演化(簡諧振盪)後，到時間 $t$ 再組合！

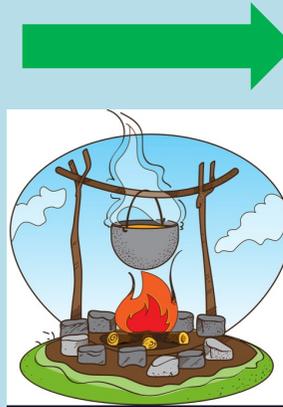
起始各個配料 $X_i(x)$ 依配方 $c_i$ 收集



各個配料按分離烹煮 $T_i(t) \sim \cos(\omega_i t)$   
各自演化後，最後合體！



=



$$\phi(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i X_i(x) \cdot T_i(t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i X_i(x) (A_i \cos \omega_i t)$$

這樣的波函數顯然既滿足波方程式，又滿足起始條件，就是唯一解。

以兩端固定弦為例，一般解：

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) (A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t)$$

係數由起始條件決定：例如鋸齒狀起始條件：

$$\phi(x, 0) = u_0(x) \quad \frac{\partial \phi(x, 0)}{\partial t} = 0$$

$t = 0$ 代入第一式 $\phi$ ：餘弦為一，正弦為零。

$$u_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

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

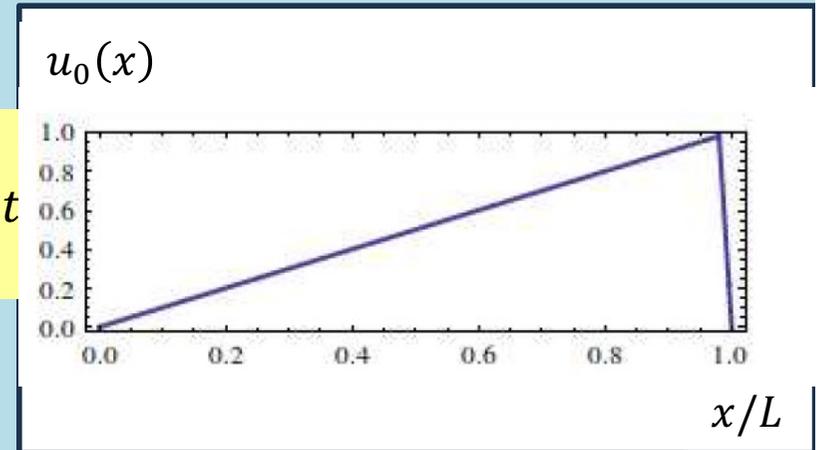
這是將起始條件 $u_0(x)$ 分解為本徵函數 $X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ 的線性組合的無限級數。

$t = 0$ 代入 $\partial\phi/\partial t$ ：

$$0 = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{n\pi}{L} v \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$B_n = 0$$

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{2L} \frac{(-1)^n}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cos \omega_n t$$



INTRODUCTION TO  
QUANTUM  
MECHANICS

THIRD EDITION



DAVID J. GRIFFITHS  
DARRELL F. SCHROETER