

對照表

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

$$-\mathbf{A} \cdot \mathbf{X}$$

$$\mathbf{A}$$

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

$$\mathbf{a}$$

$$-\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a}$$

矩陣的本徵值方程式！

$$a_j \sim e^{-ip_j} \text{ or 虛數部 } \sin p_j$$

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

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

$$\frac{d^2}{dx^2}$$

微分運算稱為算子operator

$$\phi = X(x) \cdot \cos(\omega t + \phi)$$

$$X(x)$$

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

算子 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵值方程式！

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

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

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

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

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

$$\psi(x)$$

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

算子 \hat{H} 的本徵值方程式！

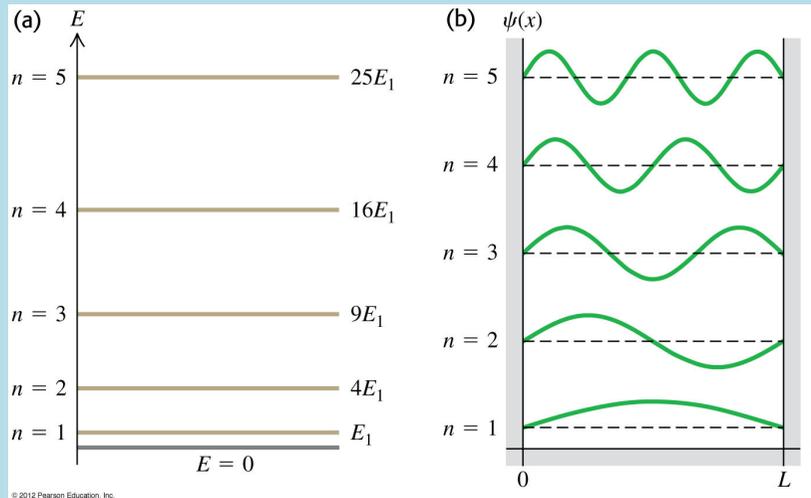
待解

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！

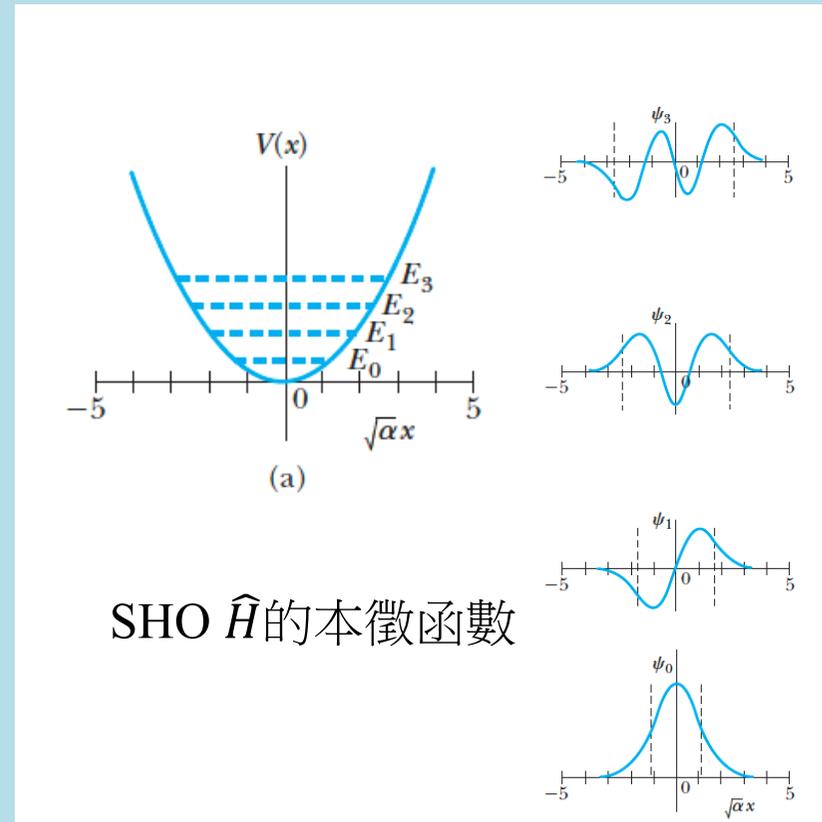
$X(x)$ 就稱為微分算子Differential Operator $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本徵函數！

薛丁格波方程式可分解的定態解的空間部分 $\psi(x)$ ，
就是代表能量的微分算子的本徵函數。

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



無限大位能井 \hat{H} 的本徵函數



SHO \hat{H} 的本徵函數

Under boundary conditions, the equation has a countable set of solutions.

We can usually classify them by natural numbers: n .

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。

與時間無關的薛丁格方程式也可以以 \hat{H} 運算子表述：

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

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

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 。

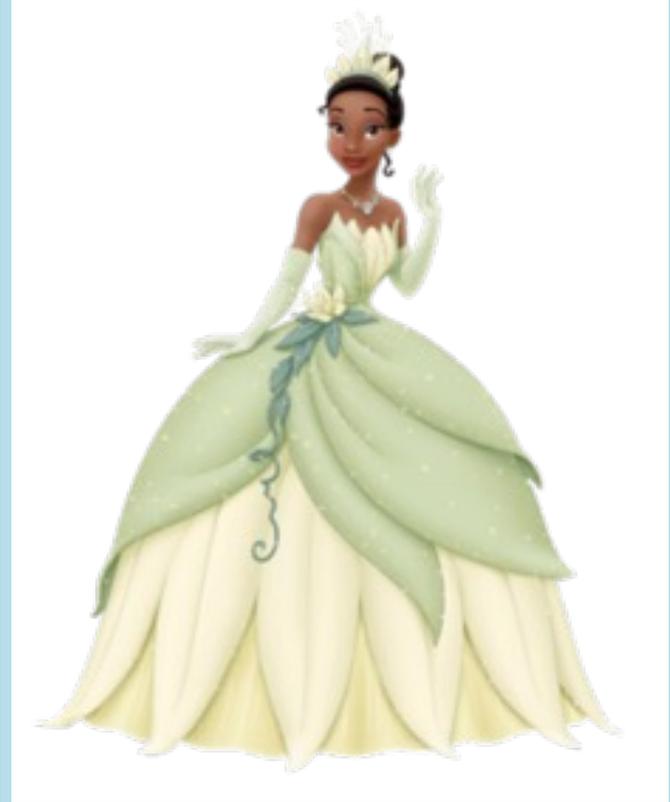
$$\psi(x)$$

狀態由一個位置的函數代表

$$\hat{A}$$

物理量會對應算子，

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



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： $\langle \hat{H} \rangle$

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

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

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 ψ_n 描述的電子狀態的能量測量不確定性： ΔH 。

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

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

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

$$\Delta H = 0$$

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！

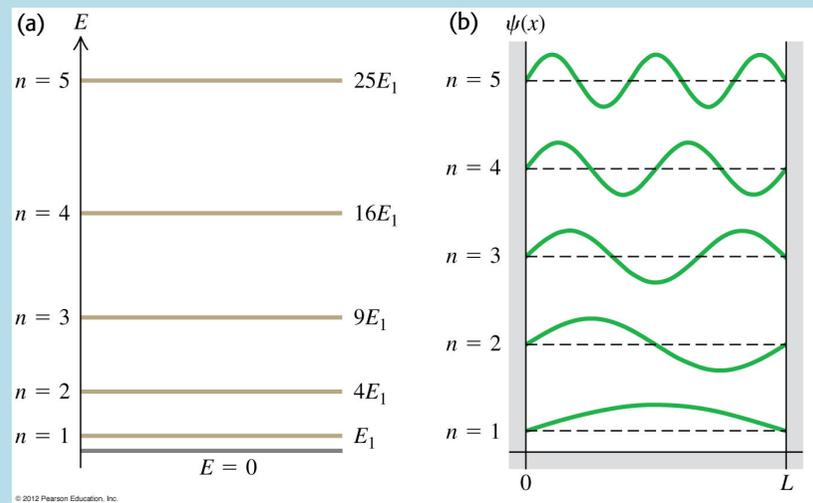
可以說定態 ψ_E 是具有特定確定能量的測量值為 E 的狀態。

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！

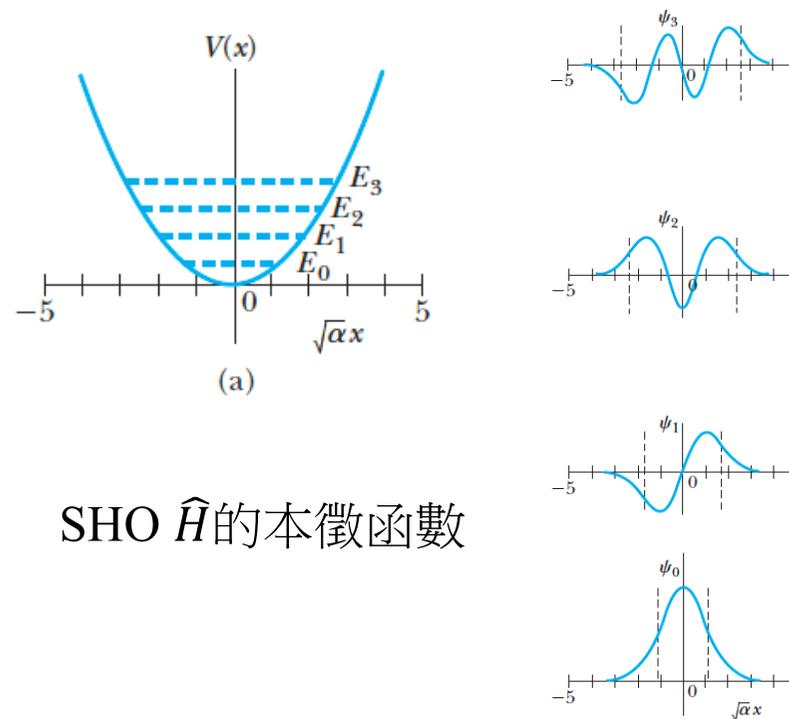
$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

$$\langle H \rangle = E$$

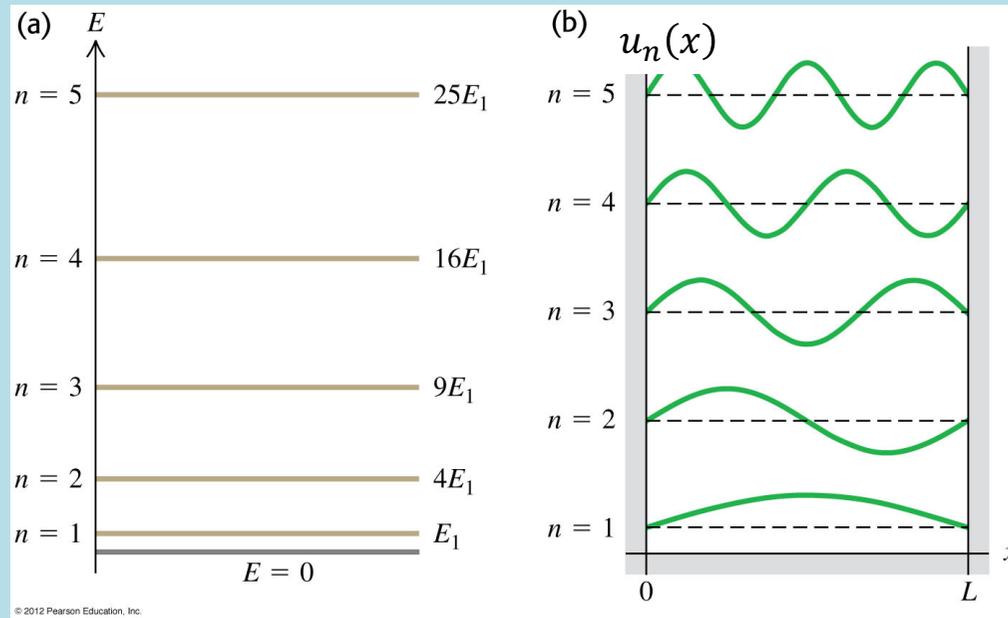
$$\Delta H = 0$$



無限大位能井 \hat{H} 的本徵函數



SHO \hat{H} 的本徵函數



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。

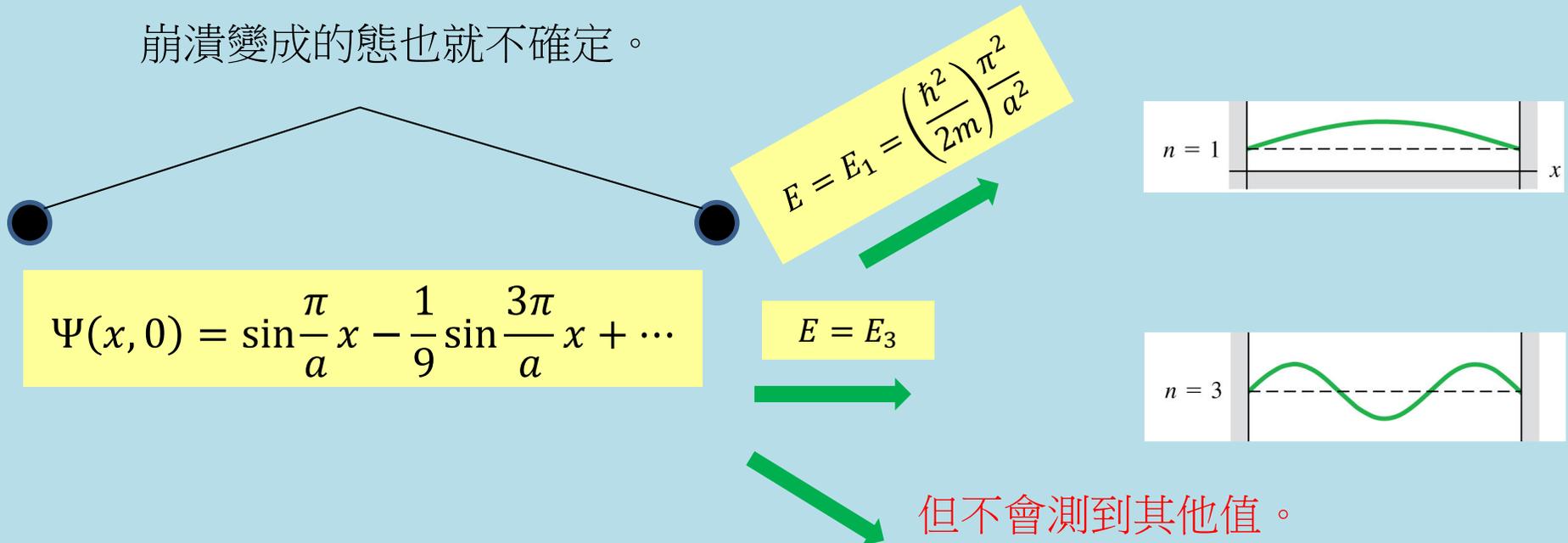
解能量算子本徵值、是在決定測量能量時會得到什麼結果：只會是 E_n 其中之一。

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 ，
 測量完畢後，狀態已經不會再是結果不確定的狀態 $\psi(x)$ ，
 而是結果完全確定的本徵函數 $u_n(x)$ 。

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

$$\psi(x) \xrightarrow{\hat{H} \rightarrow E_n} u_n(x)$$

在非本徵狀態 $\psi(x)$ ，測量結果不會是確定的！
 崩潰變成的態也就不確定。



解能量量算子的本徵函數、是在決定你測量能量後崩潰到什麼狀態。

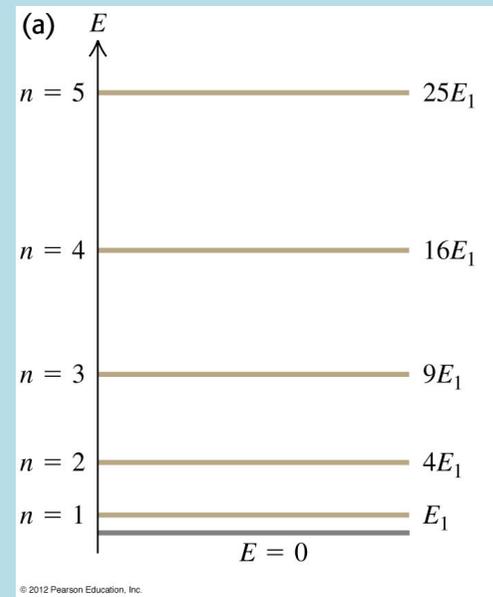
這個結果不只適用於能量，對任何測量物理量如位置、動量、角動量都成立。

$$\psi(x)$$

狀態由一個位置的函數代表

$$\hat{A}$$

物理量會對應算子，它是很有個性的！
由它來決定測量的結果有哪些可能！



算子有它的堅持！

解一個物理量算子的eigenfunction、是在決定你測量此量時會得到什麼結果。

薛丁格波方程式可分解的定態解的空間部分，
也就是能量微分算子的本徵函數 u_n ，

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

在推廣的函數內積下，彼此正交Orthogonal，而且是完備的complete。

任意符合邊界條件的起始條件空間函數都可以以 u_n 展開，係數可以投影計算。

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

u_n 是“符合邊界條件空間函數組成的無限維向量空間”的一組基底。

以上是整個古典波、量子波動力學的核心，

在之前的特例，如位能井、自由粒子、SHO已經說明。

但事實上適用於非常大範圍的薛丁格波方程式。

術語稱為 Sturm-Liouville Problem 算子的本徵函數問題

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} f(x) \right] + q(x) \cdot f(x) = \lambda \cdot f(x)$$

λ 是數：本徵值，邊界條件下通常只有某些值，此式才有解。

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



Jacques Sturm 1803-1855



Joseph Liouville 1809-1882



École Polytechnique

術語稱為 Sturm-Liouville Problem 算子的本徵函數問題

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} f(x) \right] + q(x) \cdot f(x) = \lambda \cdot f(x)$$

We can denote the operation on the function $f(x)$ as an operator \hat{A} .

$$\hat{A} \equiv \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] + q(x)$$

The equation can be written as:

$$\hat{A} \cdot f(x) = \lambda \cdot f(x)$$

This will be called Sturm-Liouville or Eigenfunction Equation of Operator.

Boundary Conditions

$$\hat{A} \cdot f(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} f(x) \right] + q(x)f(x) = \lambda f(x)$$

Under boundary conditions, the equation has a countable set of solutions.

We can usually classify them by natural numbers: n .

The eigenfunctions are u_n and their corresponding eigenvalues are λ_n .

$$\hat{A} \cdot u_n(x) = \lambda_n \cdot u_n(x)$$

$$\hat{A} \cdot u_n(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} u_n(x) \right] + q(x)u_n(x) = \lambda_n \cdot u_n(x)$$

本徵值皆為實數：

$$\lambda_n^* = \lambda_n$$

不同本徵值的本徵函數滿足如下正交關係，因此可取為orthonormal：

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x) = \delta_{nm}$$

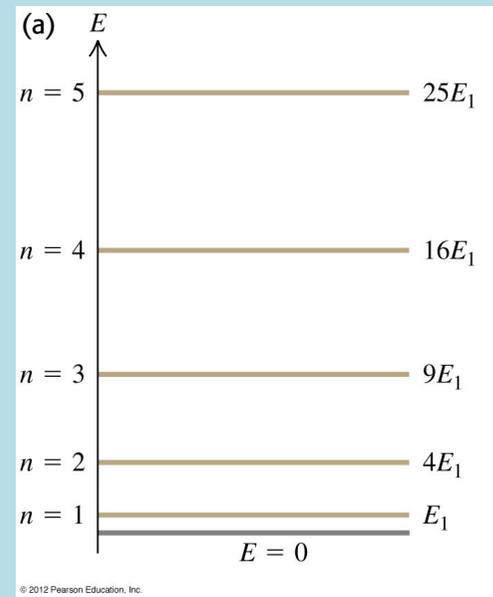
稱以上關係為正交，代表我們把以上函數乘積的積分視為內積！

$$\psi(x)$$

狀態由一個位置的函數代表

$$\hat{A}$$

物理量會對應算子，它是很有個性的！
由它來決定測量的結果有哪些可能！



算子有它的堅持！

解一個物理量算子的eigenfunction、是在決定你測量此量時會得到什麼結果。

\hat{A} 的所有本徵值 λ_n 都是實數！

All n eigenvalues λ of a **symmetric matrix** \mathbf{S} are real.

Proof:

$$\mathbf{S}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$$

Take an inner product of the both sides with the complex conjugate of eigenvector \mathbf{u}^* .

$$\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{S}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{u}$$

$\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{u} = u_1^*u_1 + u_2^*u_2$ is real. 這是複數行向量的內積，定義必定為實數。

要確認 $\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{S}\mathbf{u}$ 是否是實數，取他的 Complex conjugate

$$(\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{S}\mathbf{u})^* = \left(\sum_{i,j=1}^2 u_i^* S_{ij} u_j \right)^* = \sum_{i,j=1}^2 u_i S_{ij}^* u_j^* = \sum_{i,j=1}^2 u_j^* S_{ij} u_i = \sum_{i,j=1}^2 u_j^* S_{ji} u_i = \mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{S}\mathbf{u}$$

\mathbf{S} 實數

對稱

確認 $\mathbf{u}^{*\text{T}}\mathbf{S}\mathbf{u}$ 是實數，因此 λ 一定是實數。

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot \hat{A}u_n(x) = \lambda_n \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_n(x)$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ u_n^* \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] u_n + q(x) u_n^* u_n \right\}$$

Take the complex conjugate of the above equation:

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ u_n \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] u_n^* + q(x) u_n u_n^* \right\} = \lambda_n^* \int_a^b dx \cdot u_n^* u_n$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ -\frac{du_n}{dx} p \frac{du_n^*}{dx} + q u_n^* u_n \right\} + \left(u_n \left[p \frac{du_n^*}{dx} \right] \right) \Big|_a^b$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ \frac{d}{dx} \left[p \frac{du_n}{dx} \right] u_n^* + q u_n u_n^* \right\} + \left(u_n^* \left[p \frac{du_n}{dx} \right] \right) \Big|_a^b$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ \frac{d}{dx} \left[p \frac{du_n}{dx} \right] + q u_n \right\} u_n^* = \int_a^b dx \cdot [\hat{A}u_n] u_n^* = \lambda_n \int_a^b dx \cdot u_n u_n^*$$

$$\lambda_n^* = \lambda_n$$

\hat{A} 的所有本徵函數 $u_n(x)$ 彼此正交：

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x) = \delta_{nm}$$

The n eigenvectors \mathbf{u} can be chosen to be orthogonal.

Proof:

Consider two eigenvectors with different eigenvalues:

$$\mathbf{S}\mathbf{u}^{(1)} = \lambda_1 \mathbf{u}^{(1)} \quad \mathbf{S}\mathbf{u}^{(2)} = \lambda_2 \mathbf{u}^{(2)}$$

將第一式與 $\mathbf{u}^{(2)}$ 作內積，可得：

$$\mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{S}\mathbf{u}^{(1)} = \lambda_1 \mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)}$$

左邊可以寫成： $S_{ij} = S_{ji}$ $\mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{S}\mathbf{u}^{(1)} = (\mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{S}\mathbf{u}^{(1)})^T = \mathbf{u}^{(1)T} \cdot \mathbf{S}^T \mathbf{u}^{(2)}$

$$\mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{S}\mathbf{u}^{(1)} = \sum_{i,j=1}^2 u_{2i} S_{ij} u_{1j} = \sum_{i,j=1}^2 u_{1j} S_{ji} u_{2i} = \mathbf{u}^{(1)T} \cdot \mathbf{S}\mathbf{u}^{(2)} = \mathbf{u}^{(1)T} \lambda_2 \mathbf{u}^{(2)} = \lambda_2 \mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)}$$

得：

$$\lambda_1 \mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)} = \lambda_2 \mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)}$$

$$\mathbf{0} = (\lambda_1 - \lambda_2) \mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)} \quad \text{兩式相減：}$$

右式兩本徵向量的內積必須為零，彼此正交！

$$\mathbf{u}^{(2)T} \mathbf{u}^{(1)} = \mathbf{u}^{(2)} \cdot \mathbf{u}^{(1)} = 0 \quad \text{本徵向量的正交性}$$

證明：

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot \hat{A}u_m(x) = \lambda_m \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x)$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ u_n^* \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] u_m + q(x) u_n^* u_m \right\}$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ -p \frac{du_n^*}{dx} \frac{du_m}{dx} + qu_n^* u_m \right\} + \left(u_n^* \left[p \frac{du}{dx} \right] \right) \Big|_a^b$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ \frac{d}{dx} \left[p \frac{du_n^*}{dx} \right] u_m + qu_n^* u_m \right\} + \left(\left[p \frac{du_n^*}{dx} \right] u_m \right) \Big|_a^b$$

$$= \int_a^b dx \cdot \left\{ \frac{d}{dx} \left[p \frac{du_n^*}{dx} \right] + qu_n^* \right\} u_m = \int_a^b dx \cdot [\hat{A}u_n]^* u_m = \lambda_n \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* u_m(x)$$

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x) = 0$$

$$\lambda_m \neq \lambda_n$$

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x) = 0$$

以上證明用到算子 \hat{A} 的這個性質：

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot \hat{A}u_m(x) = \int_a^b dx \cdot [\hat{A}u_n(x)]^* u_m(x)$$

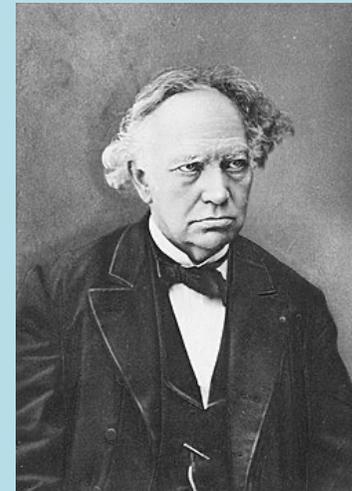
這是對任意兩函數 ϕ, ψ 都對：

$$\int_a^b dx \cdot \left\{ \phi^* \left[p \frac{d}{dx} \right] \psi + q \phi^* \psi \right\} = \int_a^b dx \cdot \left\{ \frac{d}{dx} \left[p \frac{d\phi^*}{dx} \right] + q \phi^* \right\} \psi$$

具有這樣性質的算子稱為Hermitian：

Hermitian算子的本徵值永遠是實數！

Hermitian算子不同本徵值的本徵函數彼此正交！



Charles Hermite 1822-1901

Sturm-Liouville Problem 算子的本徵函數問題：

$$\hat{A} \cdot u_n(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} u_n(x) \right] + q(x) u_n(x) = \lambda_n \cdot u_n(x)$$

本徵值皆為實數：

$$\lambda_n^* = \lambda_n$$

不同本徵值的本徵函數滿足如下正交關係，因此可取為orthonormal：

$$\int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot u_m(x) = \delta_{nm}$$

稱以上關係為正交，代表我們把以上函數乘積的積分視為內積！

把狀態類比於向量，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 類比於一組完整的基底。

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。

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：

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



$$\vec{a} = \sum_{n=1}^l a_n \hat{i}_n$$

正交定理：本徵函數彼此正交。這很像一組彼此正交的基底！

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



$$\hat{i}_m \cdot \hat{i}_n = \delta_{mn}$$

分量 c_a 可以寫成態函數與本徵函數的空間積分：

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



$$a_n = \hat{i}_n \cdot \vec{a}$$

在這對應中，最關鍵的是：我們熟悉的積分，在這向量空間內就是內積：

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



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



兩個函數乘積的積分滿足線性代數中兩向量的內積的所有性質！

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

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

用這一內積符號：

如此 u_n 的正交定理可以簡化寫成：

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



$$\langle u_n, u_m \rangle = \delta_{mn}$$

函數展開的分量可以寫成：

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



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

u_n 就是正交基底。



這是驚人的簡化，省去書寫積分的麻煩。

更重要、它揭露了量子狀態、即狀態函數的數學結構：有內積的向量空間。

這個內積在前換互換後，會變為複數共軛。

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

可見一個狀態函數 ψ 與自己的內積一定是實數，

$$\langle \psi, \psi \rangle^* = \langle \psi, \psi \rangle \quad \text{對應向量的長度平方。}$$

這個內積可以用來書寫一個狀態函數 ψ 的歸一化條件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)^* \cdot \psi(x) \equiv \langle \psi, \psi \rangle = 1 \quad \psi \text{ 只能是單位向量！}$$

現在開始完備性的證明！

Sturm-Liouville Problem

$$\hat{A} \cdot u_n(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} u_n(x) \right] + q(x) u_n(x) = \lambda_n \cdot u_n(x)$$

Under boundary conditions, the equation has a countable set of solutions.

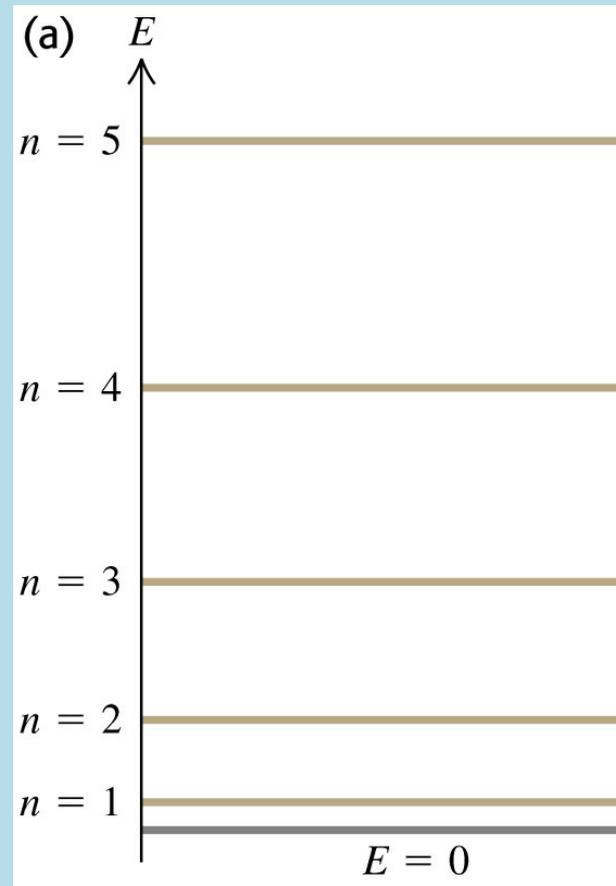
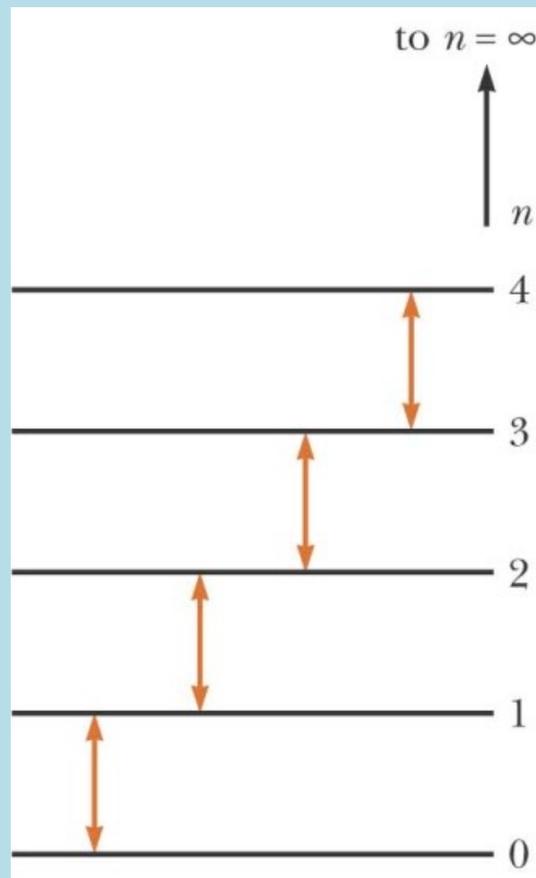
We can classify them by n and order them by eigenvalues from small to large:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots$$

It could be proven that λ_n is unbounded: $\lambda_n \rightarrow \infty, \text{ as } n \rightarrow \infty$

We'll skip the proof of this crucial step since it's too technical.

But it is reasonable and true for the examples we talked about.



$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots$

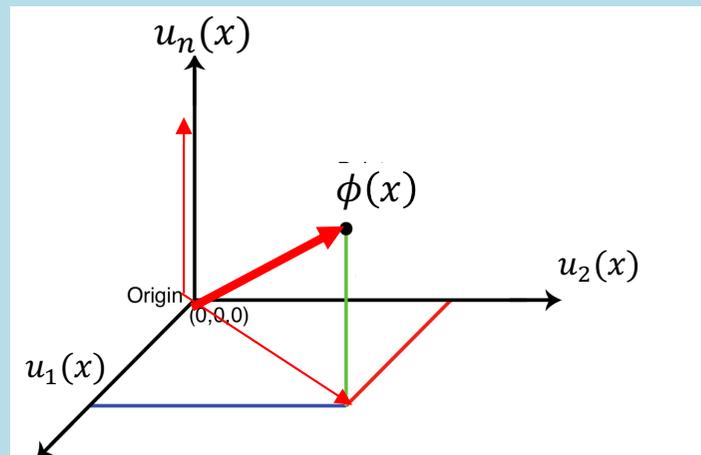
每一個本徵值 λ_n 對應一個函數 $u_n(x)$ ，

$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots$ 每一個本徵值 λ_n 對應一個函數 $u_n(x)$ ，

用向量的類比，每一個 $u_n(x)$ 都是一個彼此正交單位向量，展開一維的空間：

$u_n(x)$ 是一個彼此正交歸一的座標系統，直覺是：任一函數可以以此展開！

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [a_n u_n(x)]$$



這個可以嚴格證明的數學性質稱為： $u_n(x)$ 是完備的complete。

展開定理：任一狀態函數 ψ 可以此 \hat{A} 本徵函數 $u_n(x)$ 作分量展開。

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [a_n u_n(x)]$$

若是分量展開是可能的，那分量 c_a 可以寫成：

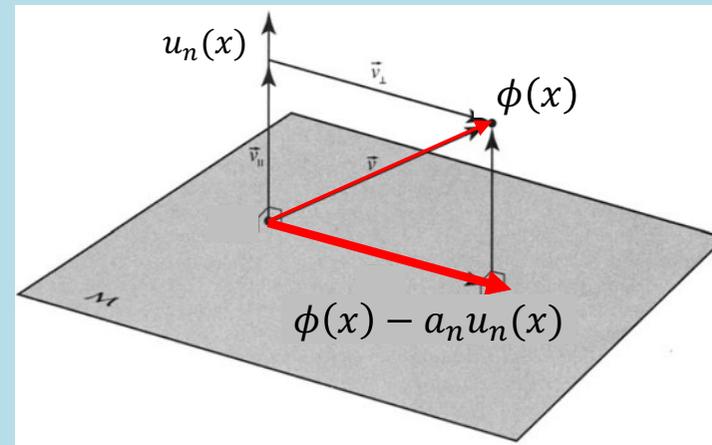
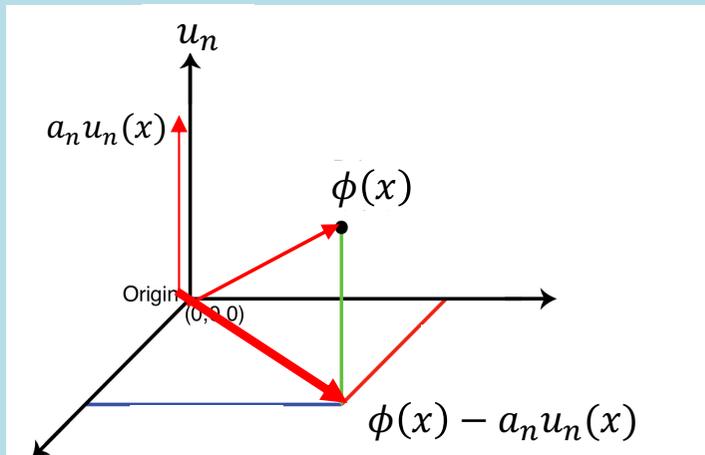
$$a_n = \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot \psi(x)$$

所以要證明的是：用如此分量 c_a 寫成的級數，會趨近正確的狀態函數：

$$\sum_{i=1}^n [a_i u_i(x)] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \psi(x)$$

趨近的數學判準之一，兩者差距的平方和(積分) $N \rightarrow \infty$ 時，趨近於零。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b dx \left[\phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x) \right]^2 = 0$$



每一個 $u_n(x)$ 都是一個彼此正交單位向量，展開一維的空間：

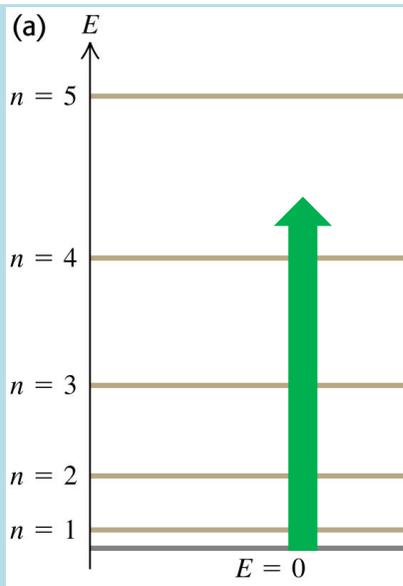
任一函數 $\phi(x)$ ，投影在向量 $u_n(x)$ 方向的分量可以算

$$a_n = \int_a^b dx \cdot u_n(x)^* \cdot \phi(x)$$

函數 $\phi(x)$ 扣掉此投影後，就與 $u_n(x)$ 的正交： $\phi(x) - a_n u_n(x)$

$$\langle u_n, [\phi - a_n u_n] \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot u_n(x)^* \cdot [\phi(x) - a_n u_n(x)] = 0$$

扣掉投影 $a_n u_n$ 的動作，壓縮此函數的空間，使只能存在於與 u_n 正交的平面上。



我們可以由下而上，一層一層將一函數 $\phi(x)$ 的投影 $a_i u_i$ 扣掉，

$$g_{n-1}(x) \equiv \phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x)$$

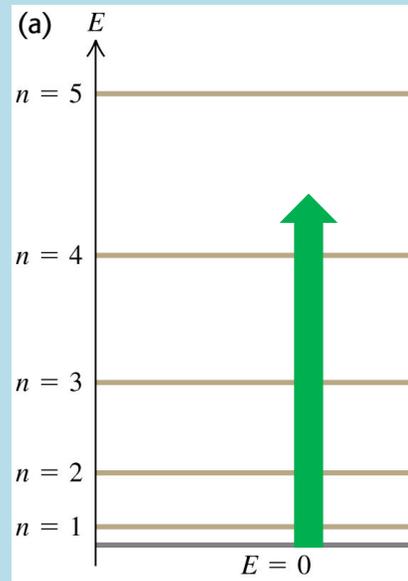
結果與 N 以下所有的向量 $m < n$ 都正交：

$$\langle u_m, g_{n-1} \rangle = \int_a^b dx \cdot u_m(x)^* \cdot \left[\phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x) \right] = 0$$

如此函數被壓縮於“越來越高、越來越小”的空間中，直覺是向量長度會越來越短。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |g_{n-1}|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b dx \left[\phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x) \right]^2 = ? 0$$

這正是完備性的數學判準，函數與其展開的差距的平方積分 $n \rightarrow \infty$ 時，趨近於零。



$g_{n-1}(x)$ 就是函數 $\phi(x)$ 、與其展開的有限級數之間的差距：

$$g_{n-1}(x) \equiv \phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x)$$

$g_{n-1}(x)$ 函數 $n \rightarrow \infty$ 時，會被壓縮於越來越高、越來越限縮的空間中，

$g_{n-1}(x)$ 函數的集合，也就是這個越來越限縮的空間，給個符號 V_{n-1}

注意 $u_m, m < n$ 不在這空間中，因為 $g_{n-1}(x)$ 與他們都正交。

當 $n \rightarrow \infty$, $g_{n-1}(x)$ 函數被壓縮於越來越小、越來越限縮的空間 V_{n-1} ,
何謂越來越小、越來越限縮的空間？

將證明，在此空間中的向量 $g_{n-1}(x)$, 其向量長度小於本徵值的倒數：

$$|g_{n-1}|^2 < \frac{c}{\lambda_n}$$

已知：

$$\lambda_n \rightarrow \infty, \text{ as } n \rightarrow \infty$$

因此：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |g_{n-1}|^2 \rightarrow 0$$

Rayleigh quotient 瑞利之商

對任一函數 $u(x)$ ，S-L算子 \hat{A} ，可以定義一個商：

$$R[u] = \frac{\langle u, \hat{A}u \rangle}{|u|^2}$$

定理一：

瑞利之商的極值就是 \hat{A} 的本徵值，發生在本徵函數時。

瑞利之商的最小值就是 \hat{A} 的最小本徵值 λ_1 。

最小值發生時的函數 u 就是本徵值 λ_1 對應的本徵函數 u_1 。

$$\lambda_1 \leq R[u] = \frac{\langle u, \hat{A}u \rangle}{|u|^2}$$

定理二：

若只對與 $u_m, m < n$ 正交的 $g_{n-1}(x)$ 算 $R[g_{n-1}]$ ，最小值為次一個本徵值 λ_n 。

最小值發生時的函數 u 就是本徵值 λ_n 對應的本徵函數 u_n 。

$$\lambda_n \leq R[g_{n-1}] = \frac{\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle}{|g_{n-1}|^2}$$

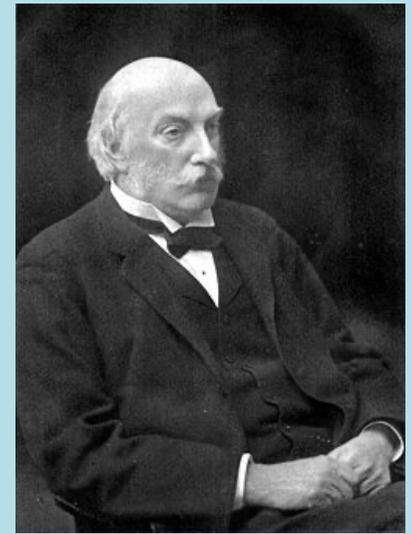
注意：

$$|g_{n-1}|^2 \leq \frac{\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle}{\lambda_n}$$

若分子有限，

$$|g_{n-1}|^2 < \frac{c}{\lambda_n} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} |g_{n-1}|^2 \rightarrow 0$$

完備性就得證了！



Lord Rayleigh 1842-1919

Rayleigh quotient 瑞利之商有一個很簡單性質：

對任一算子 \hat{A} 的本徵函數 $u_n(x)$ ，

$$\hat{A} \cdot u_n = \lambda_n \cdot u_n$$

瑞利之商就等於其本徵值：

$$R[u_n] = \frac{\langle u_n, \hat{A}u_n \rangle}{|u_n|^2} = \frac{\langle u_n, \lambda_n u_n \rangle}{|u_n|^2} = \frac{\lambda_n \langle u_n, u_n \rangle}{|u_n|^2} = \lambda_n$$

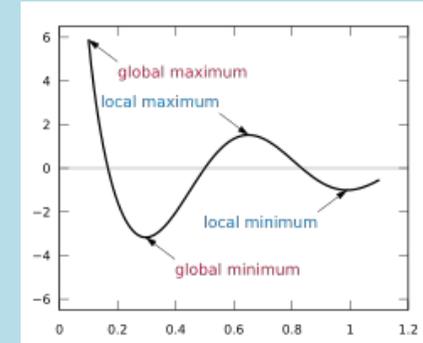
$$R[u_n] = \lambda_n$$

定理一證明：

瑞利之商的極值可以用常見的極值計算法找：

極值之處斜率為零，極值附近函數圖形是平的：

$$\frac{df}{dx} = 0$$

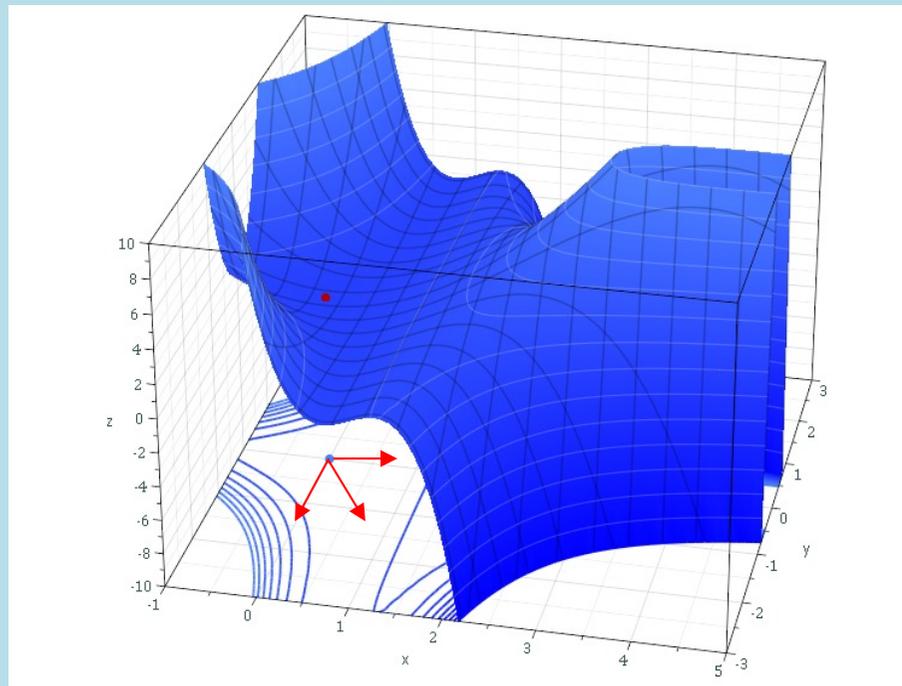


現在可變的量不是變數，而是函數。

但原理相同，極值是谷底，附近函數是平坦的。假設極值發生在某函數 $u_*(x)$ ，

u_* 加上任意一點小偏移deviation $tu(x) : u_*(x) + tu(x)$ ，變化率為零：

$$\frac{d}{dt} R[u_* + tu] = 0$$



$$\frac{d}{dt}R[u_* + tu] = 0$$

$$R[u] = \frac{\langle u, \hat{A}u \rangle}{|u|^2}$$

$$R[u_* + tu] = \frac{\langle (u_* + tu), \hat{A}(u_* + tu) \rangle}{|u_* + tu|^2}$$

$$= \frac{\langle u_*, \hat{A}u_* \rangle + 2t\langle u, \hat{A}u_* \rangle + t^2\langle u, \hat{A}u \rangle}{|u_*|^2 + t^2|u|^2 + 2t\langle u, u_* \rangle}$$

注意：

$$\langle u_*, \hat{A}u \rangle = \langle \hat{A}u_*, u \rangle = \langle u, \hat{A}u_* \rangle$$

在 $t = 0$ 取微分需為零：

$$\frac{dR[u_* + tu]}{dt}(t = 0) = \frac{2\langle u, \hat{A}u_* \rangle|u_*|^2 - 2\langle u_*, \hat{A}u_* \rangle\langle u, u_* \rangle}{|u_*|^4} = 0$$

$$\langle u, \hat{A}u_* \rangle|u_*|^2 - \langle u_*, \hat{A}u_* \rangle\langle u, u_* \rangle = 0$$

$$\langle u, \hat{A}u_* \rangle - \frac{\langle u_*, \hat{A}u_* \rangle}{|u_*|^2} \langle u, u_* \rangle = 0$$

$$\langle u, \hat{A}u_* \rangle - R[u_*]\langle u, u_* \rangle = 0$$

$$\langle u, \hat{A}u_* - R[u_*]u_* \rangle = 0$$

此式對任意 $u(x)$ 都要成立，唯一可能：內積中的右邊必須為零！

$$\hat{A}u_* - R[u_*]u_* = 0 \quad R[u_*] \text{ 是一個數，因此瑞利之商的極值必須是本徵值！}$$

$\hat{A}u_* - R[u_*]u_* = 0$ 瑞利之商的極值必須是本徵值！

而且極值發生的函數 u_* 就是本徵函數。

因為所有本徵函數的瑞利之商就等於其本徵值，

最小瑞利之商必須是最小的本徵值： λ_1 ！

而且極值發生的函數 u_* 就是本徵函數 u_1 。

$$\lambda_1 \leq R[u] = \frac{\langle u, \hat{A}u \rangle}{|u|^2}$$

定理一得證！

定理二：

若只對已扣掉 n 前面本徵函數投影的 $g_{n-1}(x)$ ，計算瑞利之商 $R[g_{n-1}]$ ，

最小值為次一個本徵值 λ_n ，發生時的函數 u 就是本徵值 λ_n 對應的本徵函數 u_n 。

$$\lambda_n \leq R[g_{n-1}]$$

證明：如定理一，最小值一定是一個本徵值。

n 前面本徵函數 $u_m, m < n$ 都不是 $g_{n-1}(x)$ ，因為所有 $g_{n-1}(x)$ 都與 $u_m, m < n$ 正交。

最小的瑞利之商 $R[g_{n-1}]$ 只能是下一個本徵值： λ_n 。

$$\lambda_n \leq R[g_{n-1}]$$

定理二得證！

現在只剩最後一步： $\lambda_n \leq R[g_{n-1}] = \frac{\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle}{|g_{n-1}|^2}$

注意： $|g_{n-1}|^2 \leq \frac{\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle}{\lambda_n}$

$$\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle = \left\langle \left(\phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x) \right), \hat{A} \left(\phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x) \right) \right\rangle$$

$$= \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle - \left\langle \phi, \sum_{i=1}^{n-1} a_i \hat{A}u_i \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i, \hat{A}\phi \right\rangle + \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} a_j^* a_i \langle u_j, \hat{A}u_i \rangle$$

$$= \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle - \left\langle \phi, \sum_{i=1}^{n-1} a_i \hat{A}u_i \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^{n-1} a_i \hat{A}u_i, \phi \right\rangle + \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} a_j^* a_i \lambda_i \langle u_j, u_i \rangle$$

$$= \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle - \sum_{i=1}^{n-1} a_i \lambda_i \langle \phi, u_i \rangle - \sum_{i=1}^{n-1} a_i^* \lambda_i \langle u_i, \phi \rangle + \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} a_j^* a_i \lambda_i \delta_{ij}$$

$$= \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle - \sum_{i=1}^{n-1} a_i^* a_i \lambda_i - \sum_{i=1}^{n-1} a_i^* a_i \lambda_i + \sum_{i=1}^{n-1} a_i^* a_i \lambda_i = \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle - \sum_{i=1}^{n-1} a_i^* a_i \lambda_i < \langle \phi, \hat{A}\phi \rangle$$

$$|g_{n-1}|^2 \leq \frac{\langle g_{n-1}, \hat{A}g_{n-1} \rangle}{\lambda_n} < \frac{\langle \phi, \hat{A}\phi \rangle}{\lambda_n}$$

分子是有限值！

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |g_{n-1}|^2 \rightarrow 0$$

$$g_{n-1}(x) \equiv \phi(x) - \sum_{i=1}^{n-1} a_i u_i(x)$$

$g_{n-1}(x)$ ：函數 $\phi(x)$ 、與其展開的有限級數之間的差距趨近於零！

Sturm-Liouville 算子本徵函數的完備性就得證了！