Salute to 胡勇

目录

Introduction

这是我为解释该佯谬所构建的一个唯象理论：已知结果，推/找可能的数学解释/模型，但无法说明原因；该游戏的原理，藏在第??、??页，if you are able to make it——you'll find out the reason behind.；那时你就能 perfectly 解释该现象了，前提是你能活到那个时候= =，祝好运。

A mind game, originates from a book for philosopher.——Let's take "e" for example:

Rule1. 设电子(们)electron(s)有且只有，或者说我们只关心其的，两种属性：C(Color) & H(Hardness)；且每一种属性均有且只有两个属性值，(这句话不能像上一句一样换成"或者说只关心其的"，因为为了创造二元 binary 对立的局面，不允许有更多其余不同属性值出现:no more other choices)：对 C 而言，只有 B(Black) & W(White)；对 H 而言，只有 H(Hard) & S(Soft)。

Rule2. 由于这个游戏是针对开发"经典之人"的脑洞而开发的，因此，在经典的思维下，对于每一个电子，它的 C 属性被设计来只能是 B 和 W 中的某一个，不能不选(count≠0)，也不能多选(count≠2，否则就不经典，而是量子里的"叠加态"了，本 riddle 旨在说明此)；同理，它的 H 属性，也只能是 either H or S，——同样(刚开始)不能 both，不能 neither。

这样一来，电子这个 ball(经典思维)，只有 4 种属性值组合，或者说 4 种状态：(C,H)=(B,H)、(W,H)、(B,S)、(W,S)，这四个坐标值也同时代表着每个电子的 C 和 H 能同时被确定下来(但是是真的吗？)。

【剧透：但我们并没法知道，每个电子的 C 和 H 是否都能同时被确定，按照经典的思维，我们可以像写出二维平面上的一个点的坐标一样，容易地写出一个电子的(C,H)，并且肯定该(C,H)落在这四个之中的某一个；——但之后我们会发现电子的存在状态，除了这四种可能性以外，还有(B,H&S)、(W,S&H)、(B&W,S)、(W&B,S)、(B&W, H&S)这 5 种状态，其中 B&W=W&B、H&S=S&H，它们均代表 count=2 的“叠加态”；并且，不幸的是，这 9 种可能性中，前 4 种状态对于电子来说，它所处在这 4 个状态中某一个的概率=0，反而这附加的 5 种状态，才是主角。】

【注意：按照 Rule2.，由于 count=1≠2，则 B&W 应写为 B|W、B||W、BorW，即“B 或 W”的意思，而不是 B&W 所代表的“B 和 W”。但为了表示“叠加态”这种“加”的含义，我也采用了 C&H 中的符号&】

Rule3. 两种“筛选器”——一个能判断进来 input 的电子的两种属性中某特定属性的具体属性值的对象，并朝不同方向输出 output。比如记号为“$\boxed{\text{C}}$”的筛选器，能判断(C,H)=(B&W, H&S)的 e 是(B, H&S)还是(W, H&S)的；而记号为“$\boxed{\text{H}}$” 的筛选器，能判断(C,H)=(B&W, H&S)的 e 处于(B&W, H)还是(B&W,S)状态下。

它是这么工作的：若是单个电子 input$\boxed{\text{C}}$，则如果 e 的属性(C,H)=(B,H&S)，则从出口 B 出去，否则(不需要说“否则如果”，因为除此之外只有 C=W 这一种可能，而不可能有属性为 B&W 的粒子从盒子里出去——因为筛选器执行了观测操作，而观测就会导致波函数塌缩，这对应着某一种属性，或者某一些属性，部分或全部地塌缩为对应属性范围内的具体值[我们先假设观测只导致部分属性塌缩，且是“对应部分”的属性——观测啥属性，啥属性塌缩，同一粒子的另一属性保持(or 回到)叠加态(之后我们会知道，其另一个没有被观察的属性也会因一个更高优先级的规则而受影响)]，因此由于本身$\boxed{\text{C}}$不观测其 H 值，所以其 H&S 属性可以 remain H&S)从出口 W 出去，用数学符号简单表示即“(B,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=100%(B,H&S)+0%(W,H&S)”，其中加号“+”左边表示进入$\boxed{\text{C}}$之前的粒子所处状态，等号“=”右边表示出射粒子所处状态、数量百分比。该状态相比之前的状态，以及筛选器种类，就能知道是从哪个口出去的(但我们并不关心这个信息，所以没有为之安排符号)。

但我们不喜欢这样的表示，原因在于：与其说筛选器“能判断/筛选”，不如说，“能检测并且在测量的同时施加了影响”——当大量双属性都随机(或者均处于叠加态)的粒子进入筛选器$\boxed{\text{C}}$时，该过程的数学符号将变为“(B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=50%(B,H&S)+50%(W,H&S)”，如果我们从 B 口处接受，当然收到的就是数量上占

入射粒子 50%的(B,H&S)粒子了，看上去就筛选/分流了粒子们，因而称之为“筛选器”。

【对于某个口而言，它还是“过滤器”；另外，由于筛选之前，“筛选器”需要知道它是什么属性的粒子，即需要执行“测量”这个 act，所以 prefer to call it “测量装置”——这名词之后将进一步与“测量将影响粒子状态”的效应相对应。】

Game Start

Experiment1.

Q: (B,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=?、 (B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+$\boxed{\text{C}}$=?

大家可能会问，Rule3.中的(C,H)=(B,H&S)的入射电子 e 是怎么得来的？很简单，它们是另一个$\boxed{\text{C}}$的出射电子——可以说是由(B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$(即大量粒子通过 C 类筛选器)创造出来的，只需要取其两束分支中的一束 50%(B,H&S)即可。

因此后一题简化为了 50%(B,H&S)+50%(W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=?，这就回到了前一题。其中，分支一：50%(B,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=50%(B,H&S)+0%(W,H&S)，该点可由我们的“观测啥属性，啥属性塌缩，同一粒子的另一属性保持叠加态”来解释：已经被观察过一次的 Color 属性的电子，其该属性已经塌缩成 B 了，再去观察同样的粒子的 Color 属性时，该属性的塌缩态→塌缩态(不会重返叠加态后再塌缩下来)，不变，仍是 B。而另一属性 H 也没有理由改变，仍处于叠加态 H&S；同样，分支二：50%(W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=50%(W,H&S)+0%(B,H&S)。

合起来写的话，我们暂时约定从左往右依照颜色一一对应：(B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+$\boxed{\text{C}}$=50%(B,H&S)+50%(W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$=50%(B,H&S)+0%(W,H&S)+50%(W,H&S)+0%(B,H&S)。【注：合起来写并不意味着两条分支的电子们有所相互作用，可以想象成它们是先后独立进入每个共同的 next box 的】

同样的道理，也有 50%(B&W,H)+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+0%(B&W,S)以及(B&W,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+0%(B&W,S)+50%(B&W,S)+0%(B&W,H)。

1.该实验证明了电子属性的可重复测量性 repeatable，这种属性，导致电子这个属性拥有者，看上去像是个粒子。

Experiment2.

Q: (B,H&S)+$\boxed{H}$=?、(B&W,H&S)+$\boxed{C}$+$\boxed{H}$=?

同样，后者的(B&W,H&S)+$\boxed{C}$=50%(B,H&S)+50%(W,H&S)。两个分支均退化到前一个问题。——But how to deal with the former one? 现在我们来提出并过滤掉糟糕的理论，保留能解释目前所有现象的理论：

①.如果我们认为"观测啥属性，啥属性塌缩，同一粒子的另一属性保持不变"，一般地， B&W 叠加态塌缩为 1:1 的 B 和 W，则事情就将变为(B,H&S)+$\boxed{H}$=50%(B,H)+50%(B,S)；且(B&W,H&S)+$\boxed{C}$+$\boxed{H}$=50%(B,H&S)+50%(W,H&S)+$\boxed{H}$=25%(B,H)+25%(B,S)+25%(W,H)+25%(W,S)。

②.如果我们认为"观测啥属性，啥属性塌缩，同一粒子的另一属性回到叠加态"(其原因之后解释)，则第一个问题的解为(B,H&S)+$\boxed{H}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)；而第二个问题的解为(B&W,H&S)+$\boxed{C}$+$\boxed{H}$=50%(B,H&S)+50%(W,H&S)+$\boxed{H}$=25%(B&W,H)+25%(B&W,S)+25%(B&W,H)+25%(B&W,S)。

③.如果我们认为"观测任何属性，同一粒子的两个属性均塌缩"。该点是最经典的想法，因为一旦塌缩就没法回到叠加态了(我们臆想的规则没法帮它回到叠加态)，每个粒子从第一个 box 开始，就已经变成(B,H)、(W,H)、(B,S)、(W,S)四者之一，并且属性不会再改变了。

该观点下的第一个问题的解：(B,H&S)+$\boxed{H}$=50%(B,H)+50%(B,S)，与①.相同；第二个问题的解直接就是：(B&W,H&S)+$\boxed{C}$+$\boxed{H}$=25%(B,H)+25%(B,S)+25%(W,H)+25%(W,S)+$\boxed{H}$=25%(B,H)+25%(B,S)+25%(W,H) +25%(W,S)。【不会 4→8；而且再怎么也是说 4→16，但也懒的搞写 4→16 中那剩下的 12 项 0%了：此情形下每个 box 有 4 个出口】

1.一方面，实验结果确实也是 1:1:1:1，这说明对电子而言，C&H are unrelated.

2.另一方面，哪种想法是对的呢？由于三种对规则的预言，其最终结果均是 1:1:1:1，无法区分哪条规则是正确的、现实存在的，因此我们得 carry out new ways——one of them is to add another box.

Experiment3.

嘿嘿.事情开始变得有意思了!

科学家们做了新的实验，方法是加一个探测器：(B&W,H&S)+$\boxed{C}$+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$，或者你也可以说成(B,H&S)+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$，以考察(B,H&S)+$\boxed{H}$=50%(B,H)+50%(B,S)还是50%(B&W,H)+50%(B&W,S)。

①.如果规则长 1 号那样，则(B,H&S)+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$=50%(B,H)+50%(B,S)+$\boxed{C}$=50%(B,H)+0%(W,H)+50%(B,S)+0%(W,S)。

以后我们只关注其中的一条分支，并如下书写：(B,H&S)+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$→50%(B,H)+$\boxed{C}$→50%(B,H)+0%(W,H)。

②.其中一条分支：(B,H&S)+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$→50%(B&W,H)+$\boxed{C}$→25%(B,H&S)+25%(W,H&S)。【注意！结果并不是 25%(B,H)+25%(W,H)！，时刻牢记你自己 set up 的规则！】

③.其中一条分支：(B,H&S)+$\boxed{H}$+$\boxed{C}$→50%(B,H)+$\boxed{C}$→50%(B,H) 【不会 1→2；而且再怎么也是说 1→4，但也懒的搞写 1→4 中那剩下的 3 项 0%了】，与①.相同。

1.可惜，实验结果证明 it turns out ②. is correct.：该分支最后的输出比为(B,H&S): (W,H&S)=1:1 而不是(B,H):(W,H)=1:0。——而且该分支剩下的是(B,H&S)和(W,H&S)，而不是(B,H)和(W,H)，你可以通过在该分支后面再添加一个$\boxed{H}$来判断，结果我相信也将是 predictably 地一致。

2.这说明：electrons are not balls 电子又不像是球了，因为③.这个理论解释被现实给否定了。首先，这就不是经典的逻辑了，需要 develop 量子的；其次，量子的理论中，①.这个理论解释也被否定了，这说明“观察导致塌缩”，也不是瞎坍缩的：正如我们之前所说，“观测啥属性，啥属性塌缩，同一粒子的另一属性保持(or 回到)叠加态”，之前印证了“保持”，这里印证了“回到”——有意思吧！

3.但为什么“回到”是个什么机理呢？“保持”我们倒是很好理解，这就是①.所给出的解释的重点：“同一粒子的另一属性保持不变”——因为虽然观察了同一个对象(electron)，但是观察的不是那另一条属性的嘛。

4.这里我们就开始接触到这个游戏的核心部分了：uncertanty principle——正如“动量确定时，位置不确定；位置确定时，动量不确定”一样，不确定原则也确定地存在于(C,H)体系中：一旦 C 确定了比如为 B 或者 W，则 H 无论之前处于 H、H&S，还是处于 S，同一电子的这三种 Hardness 状态，会立马回到 H&S 这个叠加态。——该规则的优先级比“测量=塌缩”要高，或者说它的位置在程序末尾，比“测量=塌缩”更靠后：即程序先运行“测量=塌缩”，再运行“不确定性原理”；当然也可以说“不

确定性原理”在另一个并行子线程中时刻运行着，不允许自然在任何时刻做出有悖于它的 act，像个监视者/家长 superviser。

这便是这个游戏的精髓：这个游戏是用“观察/测量=塌缩”＋“不确定性原理”构造的一个精妙的迷宫，专门为少有接触物理的逻辑学家和哲学家构建的地狱之门。怪不得该迷宫来源于《这样的一本为哲学家写的书= =》！！！。

5.这也说明，我们没法构造一个能同时确定一个电子的两个特性的 box，即使该黑箱子里面装有一个$\boxed{\text{C}}$、$\boxed{\text{C}}$的两个输出端分别安装两个$\boxed{\text{H}}$。

下面我们尝试着用②.的理论来解释以下更为精妙的实验，看②.是否经得起检验。

Experiment4.

Q: (B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+两个 output 汇合+$\boxed{\text{C}}$=?

当然该问题也可被提成：(B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+$\boxed{\text{H}}$+两个 output 汇合+$\boxed{\text{C}}$=?。也就是说，在 Experiment3.的(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)后，紧接着添加“将$\boxed{\text{H}}$的两个 output 汇合并输入后续 box”的流程(比如利用“透镜”即磁聚焦，汇合本身不改变电子的任何一项属性)，然后再入最后一个$\boxed{\text{C}}$(或者说成最后两个 box 之间)。——What do you think will truly happen?

The thing is：最后从+$\boxed{\text{C}}$的两个 output 中输出的比例为 B:W=1:0。——来，我们尝试着用仅存的②.来解释它：要想使得 50%(B&W,H)以及 50%(B&W,S)汇合后，P(B)=100%，即变回(B,H&S)，解释如下：50%(B&W,H)的这束粒子流中，其电子的 Color 属性虽然是 B&W，但这相当于只是我们定性地给出了下一次观测时，$P_H(B)>0$，$P_H(W)>0$，且$P_H(B)+P_H(W)=1$；并且下一次观测束流 50%(B&W,S)时，$P_S(B)>0$，$P_S(W)>0$，且$P_S(B)+P_S(W)=1$；而且还得有首尾都回到(B,H&S)状态所要求的，$P_H(B)+P_S(B)=1$、$P_H(W)+P_S(W)=0$。现在我们需要定量地计算：

$$\begin{cases} P_H(B)+P_H(W)=1 \\ P_S(B)+P_S(W)=1 \\ P_H(B)+P_S(B)=1 \\ P_H(W)+P_S(W)=0 \end{cases}$$，四个方程四个未知数，可能一个解或无解，我们来试试：

第一个减去第三个，得到$P_H(W)=P_S(B)$；第二个减去第三个，得到$P_S(W)=P_H(B)$。将第三个方程中的两个未知数用以上两个代换，得到$P_S(W)+P_H(W)=1$，这与$P_H(W)+P_S(W)=0$ 相矛盾，哪里出了问题？——这里出了问题：首尾回到(B,H&S)状态时，应该是 $50\%P_H(B)+50\%P_S(B)=1$、$50\%P_H(B)+50\%P_S(B)=1$，因为得这么认识：[分支 H 的粒子数$\cdot P_H(B)$+分支 S 的粒子数$\cdot P_S(B)$]/粒子总数=1。

因此正确的写法应写为：$\begin{cases} P_H(B)+P_H(W)=1 \\ P_S(B)+P_S(W)=1 \\ 50\%P_H(B)+50\%P_S(B)=1 \\ 50\%P_H(W)+50\%P_S(W)=0 \end{cases}$，写成矩阵形式便是

$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$，对增广矩阵做如下变换：

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - r_1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3+r_2]{r_1-r_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_4 - r_3}$$

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$，取$P_S(W)$=1，得到一个特解$\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$。仍对于$P_S(W)$=1，观察

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$，得到其基础解系为$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$。则通解为$\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}+$ $k\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$。

我们可以取 k=-1.5，以使得 0<$P_H(B)$<1，0<$P_H(W)$<1，且都为 0.5，这样如果我们单独测量 50%(B&W,H)分支，则有 50%测得 B 或 W，这是等会我们将提及的另一个实验。——但与此同时有个严重的问题会出现，$\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 1.5 \\ -0.5 \end{pmatrix}$中的另一条分支 50%(B&W,S)，如果我们单独测它，则$P_H(B)$和$P_H(W)$均不属于 0~1 之间，根本谈不上"概率"一说。——但似乎我们仍然可以允许这样的局面出现：我们不是同时测量两条分支的：测量 50%(B&W,H)分支时，那就用 k=-1.5所对应的$\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 1.5 \\ -0.5 \end{pmatrix}$来解释；而当测量 50%(B&W,S)分支时，那就用 k=-0.5所对应的$\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1.5 \\ -0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$来解释。

事实上，唯一一个 4 个概率均非负(且不大于 1)的特解，是 k=-1时的 $\begin{pmatrix} P_H(B) \\ P_H(W) \\ P_S(B) \\ P_S(W) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，这能解释双支流合成并通过最后一个$\boxed{\text{C}}$之后的 1:0 结果。而且这似乎非常符合①.号量子观点，以及经典观点。但我们说了(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$不可能生成

50%(B,H)+50%(B,S)，这违背了不确定性原理，以及之前的实验结果。因此这个最后的希望，也将被之后的 Experiment5.的结果给无情地粉碎。

1.这样我们就解释了，为什么两条分支汇合并输入最后的 C 后，会呈现出类似 Experiment1.的结果，即 1:0；将该 Experiment4.与 Experiment1.相比，相当于两个+ C 之间多了一个“ H +两个 output 汇合”，然而结果却保持不变。结果没变，即通过最后一个 C 后的粒子属性不变，我们往前反推至通过最后一个 C 前的粒子属性不变。

——这说明两分支 50%(B&W,H)、50%(B&W,S)在进入最后一个 C 之前，且汇流后，回到了它们的来源者(B,H&S)，在进入第一个 C 之前的状态，即 100%(B,H&S)。过程用数学符号表示的话，应为 50%(B&W,H)+50%(B&W,S)=(B,H&S)，它有点像(B,H&S)+ H =50%(B&W,H)+50%(B&W,S)的逆过程。【为了对称，也可将其写为 50%(B&W,H)+50%(B&W,S)+ 聚 =(B,H&S)】

这样，看上去便单独有：50%B&W+50%B&W=B、50%H+50%S+ 聚 =H&S，很奇怪是吧：但正如数学中，两个无理数相加可以变成有理数一样；热力学中，两个不可微分的量(过程量)，之和可以是可微分的量(态函数)一样，在这里，我们也推测：叠加态与叠加态的粒子汇合，可以回到塌缩态；而塌缩态与塌缩态的粒子汇合，可以回到叠加态。

——推论便是，本身由(B,H&S)或其他干流所 generate 的分支，如果一个不落地汇流在一起，则回到初始未分支的状态(即同一属性的概率比复原)。

——这直接反应了电子的“波动性”，而且这种波是概率波。

2.将 Experiment4.与 Experiment3.相比，相当于 H 和 C 之间多了一个“两个 output 汇合”，结果却发生了改变。这意味着支流的状态与干流的状态仍然不同，我们下一个实验就将说明这一点(当然之前的数学推导也说明了这点)。

3.我们可以从另一个角度解释这个现象：“ H 并没有起到 tell 粒子的 Hardness 属性的作用，因此汇合后的粒子的 H 仍然是不确定的 H&S，根据不确定原理，我们可以 tell 合流粒子的 Color 具体是 B 还是 H；又因之前是 B，加上过程没有影响，则之后也将是 B”。

4.自从添加了 Experiment4.后，游戏便又引入了“叠加原理 Superposition”，现在是三家争鸣了：“测量=塌缩+不确定性原理+叠加原理 Superposition”。三种量子力学 basic 规则统治下的 game.

Experiment5.

Q: (B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+只考虑一条支流+$\boxed{\text{C}}$=?

当然该问题也可被提成：(B&W,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+$\boxed{\text{H}}$+只考虑一条支流+$\boxed{\text{C}}$=?。也就是说，在 Experiment3.的(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)后，紧接着添加"堵住$\boxed{\text{H}}$后其中一条支流的去路"，剩下一条(仍经过透镜后)进入最后一个$\boxed{\text{C}}$；or "将最后一个探测器$\boxed{\text{C}}$放在两支流汇聚之前的某条支流流经途中"(或者说成透镜和$\boxed{\text{H}}$之间)。——What do you think will truly happen?

相信大家意识到了这一点：该场景其实回到了 Experiment3.，没有任何区别。因此实验结果当然是五五开：fifty-fifty——即以某条支路为例，则有(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+$\boxed{\text{C}}$→50%(B&W,H)+$\boxed{\text{C}}$→25%(B,H&S)+25%(W,H&S)。

Other experiments: (这两个更简单一些)

①.(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+两个 output 汇合+$\boxed{\text{H}}$=?

直接就相当于 Experiment2.的第一个问题，因为我们证明了"$\boxed{\text{H}}$+两个 output 汇合"不会导致结果改变，其原因在于粒子经过这样一个体系前后状态不变。但当然也愿意在此书写一下稍有不同的过程：(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$+$\boxed{\text{聚}}$+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)+$\boxed{\text{聚}}$+$\boxed{\text{H}}$=(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)。

②.(B,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+两个 output 汇合+$\boxed{\text{H}}$=?

也直接就相当于 Experiment2.的第一个问题，因为我们证明了"$\boxed{\text{C}}$+两个 output 汇合"不会导致结果改变，其原因在于粒子经过这样一个体系前后状态不变。但当然也愿意在此书写一下稍有不同的过程：(B,H&S)+$\boxed{\text{C}}$+$\boxed{\text{聚}}$+$\boxed{\text{H}}$=50%(B,H&S)+50%(B,H&S)+$\boxed{\text{聚}}$+$\boxed{\text{H}}$=(B,H&S)+$\boxed{\text{H}}$=50%(B&W,H)+50%(B&W,S)。

Ok，量子力学的世界正希望你偷窥，这只是个引子——接下来你对《量子力学》的每一次观测，都将导致《量子力学》塌缩成另一个你不熟悉的模样，但若观测次数够多，你将越来越能描绘《量子力学》的全貌，并且即使你觉得你把握了规律，在下一次尝试着理解它时，也没法保证它不以新的困惑为姿态，呈现在你这个 observer 眼前。

——That's where beauty lies.

正如：You'll see what you want to see, or rather, she'll force you to see what you don't want to see. 然而，正如后者仍然属于前者: what you don't want to see, is actually exactly what you want to see.，你仍然属于《量子力学》。

——Beauty hides in the deep.

1.你时刻在观察你自己，所以你“总+只”处在该宇宙。——Parallel Universes.

2.半导体不是自然的产物。——但自然规律允许它的存在。

3.Quantum Computer 处理并行问题更优秀。——处理串行问题没有 conventional 的计算机的好。

正如“谁不对量子物理感到困惑，他肯定不懂它”可被视为创建者对[(因自己也不太懂而心有余悸)的光明正大]的 cover 掩饰一样，接下来崎岖、千回百转、跳跃式的、逻辑与非逻辑相互交错的(主体还是逻辑的，非逻辑只是为了契合公有的认识而身不由己的折中/compromise)、抑扬顿挫、非线性的认识之路，也可视为我对测量量子力学所得到的，对一次次无法解释的测量结果的撇脚的解释。毕竟一千个读者一千个哈姆雷特。但要是读者基数够大，那离哈姆雷特的全貌也就不远了。——正如马克思所言，一个人是他一切社会关系的总和，一个学科也是由它在每个人心中的投影，反过来全息投影得到的立体图像，不是么?

林尽(you have no way but to strive for sth)水源，便得一山$\xrightarrow{\text{you find a hope}}$山有小口，仿佛若有光$\xrightarrow{\text{you decided to have a try}}$便舍船，从口入$\xrightarrow{\text{you find difficulties}}$初极狭，才通人$\xrightarrow{\text{you'll never give up}}$复行数十步$\xrightarrow{\text{if you made it}}$豁然开朗。

Quantum Mechanics In One Dimension

一.Sth about “operator”

1.(取)(空间)平均值算符：<>

①.Discrete Variables :<f>=$\sum_f f \cdot p(f)$

【这是撇脚 or 高深的物理学家的写法，乍一看很不数学，或者说不很数学：正常人的写法理应是$\sum_i f_i \cdot p(i)$。这两者分别很像(其实就是)统计物理中的求物理量的平均值的简并写法$\bar{O}=\frac{1}{N}\sum_l a_l O_l$，和非简并写法$\bar{O}=\frac{1}{N}\sum_i O_i$。其中$\bar{O}$=<O>=<$f$>、$O_l=f_l=f$、$\frac{a_l}{N}=p(f)$、$\sum_l = \sum_f$；而$O_i=f_i$、$\frac{1}{N}=p(i)$，也就是说，$f=f_l$是函数值为$f$的所有函数值之和，$p(f)$为这些函数值所对应的自变量个数，占了总自变量个数的百分比，它更关心/重视"简并的态们(比如它们所对应的能级)"的出现概率，关心的是$p(f)=p(f(i))$或$p(f(x))$，而不是$p(i)$或$p(x)$、P_s这些单个的态们。即更关心纵坐标，而非横坐标，有点像李楠在讲$\sum_l g_l$和$\sum_s$的区别时所提到的勒贝格积分(竖着积)和黎曼积分(横着积)的区别；而f_i就仅仅是某个自变量所对应的因变量/函数值，并不关心它的同类们】

②.Continuous Variables :<f>=$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)p(x)dx$

【这个是上面中括号中的非简并写法：$\sum_i f_i \cdot p(i)$的积分形式】

其中，用 the wave function 来表示 p(x,t)的话，$p(x,t)=|\Psi(x,t)|^2=\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$($\Psi(x,t)$作为 probability wave 的意义是 Max.Born.提出来的)。将其代入<f>中，有$<f>_\Psi=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,t)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)f(x,t)\Psi(x,t)dx=$ $<\Psi(x,t)|f(x,t)|\Psi(x,t)>$。【<||>、<|>这种表示形式之后才能解释其物理含义】

所以<>算符只是将 f 对 dx 偏积分，而不是对 dt 偏积分；即只是对物理量$f(x,t)$取空间上的平均值，也即其在一个时间断面下的、全空间上的平均值。积分时，$\Psi(x,t)$和$f(x,t)$中的 t 均看做常数。 而要想求 f 的时间平均值的话，还需对积分结果，在某一时间段上进行第二次对 dt 的积分。

③.与概率论的联系：<>=E()；X、x **被替换为了**$f(x)$

<f>=$\sum_f f \cdot p(f)=\sum_i f_i \cdot p(i)$对应概率论中的 E(X)=$\sum_i x_i p_i$。其中$p_i$=P{X=$x_i$}，它相当于离散型随机变量 X 的数学期望，f 相当于 x； <f>=$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)p(x)dx$对应概率论中的 E(X)=$\int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f(x)dx$。它相当于连续型随机变量 X 的数学期望，其 f(x)相当于 p(x)。

从概率论是数学基础的角度，似乎概率论比这里的量子力学要高级；但从概率论所处理的随机变量 X 没有这里的 f(x)形式更普遍的角度，量子力学比它要高级。——量子力学的形式，有意思就有意思在：f(x)和 p(x)是通过 x 一一对应起来的，但同时它俩 f 和 p 从物理的角度，甚至不需要 x 作为桥梁，都能一一对应起来，因而物理学家直接反数学地、直觉地写作了$\sum_f f \cdot p(f)$那个样子：f为某属性相同的所有量子态x_i上

的粒子数a_l的该属性之和，而$p(f)$为这些g_l个量子态$\mathrm{x_i}$们上的粒子数a_l所占总量子态数$\sum_l g_l$上的总粒子数 N 的比例。【当然，其实用系综理论的G_l、A_l来类比解释更贴切】

呵呵，怪不得数学家成天抱怨看不懂物理学家的天地：本是同根深，相煎何太急？...数学家那边的数学，一旦来到了物理学家手里，就被改得随心所欲、面目全非了。我就在这里稍微建立一个桥梁吧，即便这个桥梁仍可能是个独木桥...以至于数学家和物理学家同时过桥时，还是会打架(哈哈哈...哈)。

2.(取)不确定度算符：$\boldsymbol{\sigma_a = \sqrt{<(a-<a>)^2>} = \sqrt{<a^2> - <a>^2}}$

不确定度σ在数学上/概率论中，即随机变量 X 的方差 D(X)=E[$(\mathrm{X}-\mathrm{E(X)})^2$]的开根号：标准差$\sqrt{\mathrm{D(X)}}$。利用数学期望的性质，可导出 D(X)=$\mathrm{E(X^2)}-\mathrm{E^2(X)}$，于是$\sigma=\sqrt{\mathrm{D(X)}}=\sqrt{\mathrm{E(X^2)}-\mathrm{E^2(X)}}$。按照 1.③.的对应法则，替换一通，即得$\sigma_\mathrm{a}=\sqrt{<\mathrm{a}^2>-<\mathrm{a}>^2}$。

当然也可以"物理地"证明它：$<(\Delta a)^2>=<(a-<a>)^2>=<a^2-2a<\mathrm{a}>+<a>^2>=<a^2>-2<\mathrm{a}><\mathrm{a}>+<a>^2=<a^2>-<a>^2$。

当然也可很老实地写成：$\sum_a(\Delta a)^2 p(a)=\sum_a(a-<a>)^2 p(a)=\sum_a(a^2-2a<\mathrm{a}>+<a>^2)p(a)=\ldots$

3.Momentum operator：$\boldsymbol{\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$

我们习惯的是$e^{i(\omega t-kx)}=e^{\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$，但之后关心的多是空间部分而非时间部分，于是让 kx 前面是正号：$e^{i(kx-\omega t)}=e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$，这对于实部 cos 而言无关紧要，所以可行。这一步虽然奇怪，但如果不这么做，历史将改写，动量算符等其他算符形式将改变。可能这就直接归咎于创始者的癖好吧。【如果ikx不在前面的话，$\hat{p}$,$\hat{E}$都将变号，但$\frac{\hat{p}^2}{2m}$不变号，这意味着$\hat{E}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}$不变号，但$\hat{E}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$又变号了，于是薛定谔方程将变为$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\hat{V}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$。它将不再是今天的样子。或许另一个地球上的科学家用的是这种表达式，亦或是另一个平行世界的我们。——因此，此种形式的薛定谔方程也只是基本假设之一。】

以上和以下均利用到了 de Broglie 关系：$p=\hbar k$；$E=\hbar\omega$；现考虑一维情况：

对于波函数的空间部分，$\frac{\partial e^{ikx}}{\partial \mathrm{x}}=ike^{ikx}$，于是$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}=ik$。则$-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}=\hbar k=p$，定义$\hat{p}:=-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}$，于是$\hat{p}=p$(可见当被作用的函数的空间部分仅仅以$e^{ikx}$形式出现时，才有该动量算符等价于对应动量)。

4.Energy operator(总能量算符)：$\hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

对于波函数的时间部分，$\frac{\partial e^{-i\omega t}}{\partial t}=-i\omega e^{-i\omega t}$，于是$\frac{\partial}{\partial t}=-i\omega$。则$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}=\hbar\omega=E$，定义$\hat{E}:=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，于是$\hat{E}=E$。(可见当被作用的函数的时间部分仅仅以$e^{ikx}$形式出现时，才有该动量算符等价于对应动量)

【若接着定义$\hat{x}=x$，则从这之后，所有是x,p,E的函数的物理量，其对应的算符也将是它本身(当被作用的函数以$e^{i(kx-\omega t)}$形式出现时)：这是因为比如对于物理量$H=\frac{p^2}{2m}+V$，我们会顺势定义$\hat{H}:=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}$，这样一来，若定义$\hat{V}:=V$，则因$\hat{p}=p$和$\hat{V}=V$，得出$\hat{H}=H$】

对易 Commutator 关系：将对易算符[,]作用到$\hat{A}$、$\hat{B}$两个算符上，得到一个新的算符$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$，[,]的性质之一为$[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$；另外，如果$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则说$\hat{A}$和$\hat{B}$是对易的，否则它俩不对易。对易的另一个等价说法是$[\hat{A},\hat{B}]=[\hat{B},\hat{A}]$(利用了性质)、第三个等价说法是$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$。前三个说法是双向的。

第四个相关的单向说法是“对于任何一个试探函数f，Bf与f均是$\hat{A}$的本征函数、Af与f均是$\hat{B}$的本征函数”是$\hat{A}$,$\hat{B}$对易的一个充分条件。

【注，$[\hat{A},\hat{B}]$本身因$\hat{A}$,$\hat{B}$是个算符而是个算符，但若引入 test function 算出$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})f$，并方程两边消去$f$后，得到的$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$却可能不含算符，而是一个物理量(虽然所有物理量都可看做该物理量对应的算符)。于是对$\hat{A}$,$\hat{B}$进行一种运算[,]后，最终=一个物理量，这便揭示了算符$\hat{A}$,$\hat{B}$间的某种关系，称为对易关系。总的来说，对易关系是个等式，“对易”即方程左侧，“关系”即方程右侧，等号后面/右边的结果，揭示了是“何种对易关系”】

【当然，或许$\hat{A}$,$\hat{B}$经过[,]运算得到一个物理量，并不令人诧异，因为如果$\hat{A}$,$\hat{B}$本身是$\hat{x}$,$\hat{p}$,$\hat{E}$的函数的话，则$\hat{A}=A$、$\hat{B}=B$二者本身就是物理量了。但即使这样，$[\hat{A},\hat{B}]f=\hat{A}(\hat{B}f)-\hat{B}(\hat{A}f)=\hat{A}(Bf)-\hat{B}(Af)$，它不能再继续写成$A(Bf)-B(Af)=0\cdot f$，否则任何是$\hat{x}$,$\hat{p}$,$\hat{E}$的函数的$\hat{A}$,$\hat{B}$都对易了，然而$\hat{x}$,$\hat{p}$就不对易。——这种不能继续，应该是因为$f$是$\hat{A}$,$\hat{B}$的本征函数，但$Bf$,$Af$却不分别是$\hat{A}$,$\hat{B}$的本征函数，于是就没有$\hat{A}(Bf)=A(Bf)$。所以$\hat{A}=A$、$\hat{B}=B$也是有条件的：对于$\hat{A}$,$\hat{B}$的本征函数而言，才有$\hat{A}=A$、$\hat{B}=B$。

所以看得出来即使$\hat{A}$,$\hat{B}$都是$\hat{x}$,$\hat{p}$,$\hat{E}$的函数，也一般有$[\hat{A},\hat{B}]\neq[A,B]=\mathrm{AB}-\mathrm{BA}=0$——所以算符和物理量仍稍有差别，这种“差别”，就通过对易关系来体现：任何两个物理量之间一定是对易的 AB=BA，但它们的算符之间不一定。如果它们的算符也是对易的，这说明它们的算符不仅单个地满足$\hat{A}=A$、$\hat{B}=B$，而且成对地来看也和物理量无异$[\hat{A},\hat{B}]=[A,B]=0$、$\hat{A}\hat{B}$=AB=BA=$\hat{B}\hat{A}$，这样便实现了“算符与物理量之间的对易、完全

等价、可以互换”。所以，终极地讲，两个算符的对易，更像是这两个算符分别与自己的对应物理量之间的对易、“是否可互换/等价”。要做到算符可对易$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$的一个充分条件是第二层上满足$\hat{A}(Bf)=A(Bf)$、$\hat{B}(Af)=B(Af)$】

例如，$[\hat{x},\hat{p}]f(x)=x\cdot -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\cdot f)=i\hbar\neq 0$，说明$\hat{x},\hat{p}$不对易。但这种$\hat{x},\hat{p}$之间的对易关系“$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$”称为正则对易关系 Canonical Commutation relation。

5.Schrödinger equation：$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

理论力学讲过，当约束是稳定的时候，系统的哈密顿量/函数$H=T+V$，此时它等于系统的机械能，于是在该条件下，非相对论形式下，$H=\frac{p^2}{2m}+V$，那么哈密顿算符定义为$\hat{H}:=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}$。而一般总能量=机械能(若没有其他形式的能)，则此时$H=E$。【$\hat{H}=H$、$H=E$、$E=\hat{E}$将导出$\hat{H}=\hat{E}$】

将$\hat{H}=\hat{E}$作用于含时波函数$\Psi(x,t)$：$\hat{H}\Psi=E\Psi$，即$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$，此即薛定谔方程，其中$\Psi,V,E$ 一般都是含时的(即使 V 不含 t，Ψ也含 t)；且因p,V含时，则$\hat{H}$也是隐含时的，但注意$\hat{H}$并不显含时。【注：由于定态的薛定谔方程都只适用于特解ψ_n，则薛定谔方程也只适用于每个单独的特解Ψ_n，即只有Ψ_n满足$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，定态时含时总波函数$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$，以及不定态时的含时总波函数$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n(x,t)$，不满足$\hat{H}\Psi=E\Psi$。因此之后的相关的Ψ、E 其实都指的是$\Psi_n$、$E_n$；除了之后要提到的<H>之外。】

对于恒定势 potential：$V(x,t)=V(x)$，separation of variables：$\Psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t)$，两边同÷ψφ后，两边变量单一且互相独立，则应均等于一个常数，设为E。关于φ的方程，解得$\varphi(t)=e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$(在知道了此$E$即彼$E$后，它就是波函数中的时间部分$e^{i\omega t}$；并且也知道了能量 E 与 t 无关)，关于ψ的方程，即定态薛定谔方程(the time-independent Schrödinger equation)：$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi$。其中$\psi,V,E$ 都是不含时的，它也可简写作$\hat{H}\psi=E\psi$，其中要注意$\hat{H}$中的V是不含时的，但因p含时，∴$\hat{H}$也是隐含时的，但$\hat{H}$仍然不显含时。

【注：之后我们会证明，定态的薛定谔方程只适用于每个单独的特解ψ_n，即只有ψ_n满足$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，而总波函数$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$不满足$\hat{H}\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n\ \psi=E\psi$，因此这里的、到$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$之前的，符号ψ、$E$均指的是特解所对应的$\psi_n$、$E_n$。当然它也可以指总波函数ψ，除非对应的本征值$E=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$。但叠加态的总波函数不满足定态的薛定谔方程。所以说，量子态遵循态叠加原理是五大基本假设之一。至少它能很好地推导出 $E=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$这个$\hat{H}$对总波函数的本征值 E 的合理解释，而且还能得出$<\Psi_n|\Psi_m>=<\psi_ne^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|\psi_me^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}>=<\psi_n|\psi_m>=\delta_{nm}$、$<\Psi|\hat{H}|\Psi>=<\psi|\hat{H}|\psi>$——这

两个结论应该还可推广到"确定态"那，以至于$< f_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|f_m e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}>=<f_n|f_m>=\delta_{nm}$、$<F|\hat{Q}|F>=<\sum_n c_n f_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|\hat{Q}|\sum_n c_n f_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}>=<\sum_n c_n f_n|\hat{Q}|\sum_n c_n f_n>=<f|\hat{Q}|f>$。但目前来看，这个假设太烂了！然而人们偏要设$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\Psi_n$，且$\Psi_n$中$e^{-i\frac{E_n}{\hbar}0}=1$以退化为$\psi=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n$。】

【所以定态薛定谔方程的简写形式$\hat{H}\psi=E\psi$，比薛定谔方程的简写形式$\hat{H}\Psi=E\Psi$，除了波函数ψ,Ψ、E 的不同外，其中的$\hat{H}$也是不同的，差别只在于$\hat{H}$中的V，一个含时，另一个不含。】

①.定态(stationary states)

含时波函数$\Psi=\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$，于是 probability density(概率密度即概率体密度，概率流密度是面密度；但对于一维的情况而言，概率密度是线密度)：$|\Psi|^2=\Psi^*\Psi=\psi^* e^{i\frac{E}{\hbar}t}\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}=\psi^*\psi=|\psi|^2$。于是$\frac{d}{dt}|\Psi|^2=\frac{d}{dt}|\psi|^2=0$，即概率密度与时间无关，这就是定态(stationary states)的含义。【$\frac{d}{dt}f=0$才代表 f 与时间无关，它等价于 f(x,p)中不显含时间 t，但 x,p 可分别是 t 的函数，∴允许此时$\frac{\partial}{\partial t}f\neq0$；相反，$\frac{\partial}{\partial t}f=0$并不意味着 f 与时间无关，因为此时$\frac{d}{dt}f$不一定=0：比如 f=f(x,p,t)中 x 或 p 中含有时间 t，以使得$\frac{\partial}{\partial t}f=0$，但此时$\frac{d}{dt}f\neq0$；更深入的见解，可查看热统中的 113、114 页】

②.$\frac{d}{dt}$<f>=0

定态的$|\Psi|^2$与 t 无关，将导致对于一个不显含时的物理量 f(x,p)=f($\hat{x}$,$\hat{p}$)=f(x,$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$)，其空间平均值$<f>=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,p)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,p)\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)f(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x)dx$，也不含时。这里的不含时是因该式子因$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$而不再显含 t 而不再含时，即$\frac{d}{dt}<f>=0$。

【这里 f(x,p)的自变量们，构成理论力学中的 2 维相空间(q,p)；如果 x=x(t)，p=p(t)，则 p=p(x)，这样即使 f(x,p)=f(p)，对 dx 积分，也将牵涉到 f(p(x))中的 x 了；从另一个角度，当$\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$作用于Ψ，再对 dx 积分时，积分时，f($-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$)也不会袖手旁观，它也是参与了作用的。经典与量子心心相印。】

【但要注意其中的经典思想 p=p(x)并不管用：当 x 确定时，p 的值不会按照某一确定的函数关系式 p(x)，确定下来。因此 x=x(t)，p=p(t)只能成立其中一个：当你确定了某一时刻的 x，你就没法确定该时刻的 p；当你确定了某一段时间的函数关系式 x(t)，则该段时间的函数关系式 p(t)将不是个公式，而是一堆公式，以至于没有公式可

言。——所以我们之前和之后所说的，x、p 含时，并非是指 x,p 对 t 有着确定的函数/映射关系，而只是说它们都随着时间演化而已。】

【这也是为什么在量子力学里，要用算符来表示力学量，而不是用物理量 x,p 的函数 Q(x,p)：既然 t 时刻的 x,p 无法同时确定，一方面 p(x)这个确定的函数就没有意义了，它无法帮你确定 p，因此 p 必须用算符$\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$表示；另一方面，即使 x,p→Q 的函数关系式 Q(x,p) 确定了，t 时刻的 Q 也是无法确定的。Q=Q(x,p)这样的表示也就就没有什么意义了。只能以$\hat{Q}=Q(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$的方式表示物理量Q】

力学量/可观测量 dynamical variables Q(x,p)=Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)，比如 x,p,L,H,E，就属于这样不含时(independent of t)的物理量 f(x,p)，它只是 p,q 的函数，不显含时间 t，其中 x,p 可随 t 变化，则 Q(x,p)也可随时间变化，但<Q>不随时间变化：【这个有点意思：p 固定的 Q(x,p)因 x 的波动而波动，但 x 上的平均值<Q>，因只含有 p 就不随时间变化了？】

【力学量不含时这不是个假设，而是个定义。定义不显含时的物理量叫力学量。但即使是定态的 Q，也可随时间变化，这对应了 Q 测不准，之后会知道(参见第 22 页)，在测量时，它会以c_n^2的几率塌缩至$<Q_n>$】

根据上上一段的结论，当波函数Ψ对应的量子态是定态时，力学量的 Q 在全空间的平均值<Q>，与时间无关，即$\frac{d}{dt}$<Q>=0。这样，解出的每个量子态Ψ_n(注意，薛定谔方程实际上指的是每个特解所单独满足的$\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$)，所对应的本征值E_n、甚至是 x、p，这些可观测量Q_n的空间平均值$<Q_n>$，像体系总的 Q 的空间平均值<Q>一样，均都有一个确定的值。对于每个 n，$<Q_n>$值或许不同，且对应地粒子处于该量子态的几率、Q 的观测值=$<Q_n>$的几率(若态为非简并态)$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)dx=c_n^2$也都或许不同，但也都是确定的。

【非定态系统的“力学量”，甚至连其空间平均值<Q>，都可以随时间变化？】

【格里菲斯的书中 13~14 页说，当Ψ满足薛定谔方程时，可以证明$\frac{d}{dt}<1>=$ $\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}[\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)]dx=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi)dx=\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi)|_{-\infty}^{+\infty}=0$(被积函数$|\Psi|^2$是含时的，于是里面是偏导；然而积完后，是不含时的，所以用的微分)，相当于用“波函数在无穷远处的值=0”，推出了波函数在全空间上的积分=常数(并没证明这个常数是 1，而只是作为假设给出，C=1 是波函数具有物理意义的必要条件)，即证得$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$不随时间改变，它是波函数总归一化的必要条件。他用这一点来说明，薛定谔方程有这么个特征：它保证了波函数的可归一化系数不随时间变化，即如果你若归一化了$A\Psi(x,0)$，那

么$\Psi(x,t)$的归一化系数仍是 A，而不需要对每个 t 都去归一化一次，也即证明了 A(t)=常数 A。】

【这对于我们有如下启示：a.似乎我们能用$e^{i\frac{E}{\hbar}t}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$来“事后诸葛亮”地解释上面这个显而易见的事实，但是！格里菲斯强就强在他用的是薛定谔方程，而非定态的薛定谔方程！也就是说，我们用$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$来解释以上结果时，隐含着用到了“分离变量”，已经把时间项具象化了。但格里菲斯说，该结果不仅适用于定态，连非定态的、时间项不能分离出来的Ψ，都满足$|\Psi|^2$在全空间的值之和，或者说 1 的空间平均值<1>，不随时间变化(其实这是五大假设之首：只有归一化的波函数才能描述实际粒子，否则波恩的统计解释就没有意义)。——但是我们也有优势，优势在于定态的每一个空间位置上的$|\Psi|^2$，都与 t 无关，而不是每个位置上的和。所以其实对于普通的薛定谔方程，其某空间位置上的$|\Psi|^2$仍然是时间的函数。

b.接着，它又用解决上一个问题的过程中，用“$\Psi^*\cdot\Psi$的薛定谔方程$\cdot\frac{1}{i\hbar}+\Psi\cdot\Psi^*$的薛定谔方程$\cdot\frac{1}{i\hbar}=\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi$”所导出的关键公式$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2=\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi)$(几率流密度 J(x,t)也就被定义为$-\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2$)，代入$\frac{d}{dt}<x>=\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}x|\Psi|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2dx=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}x\cdot d(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi)$，然后分部积分得$\frac{d}{dt}<x>=-\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi)dx(=-\int_{-\infty}^{+\infty}\int\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2dx\,dx)$，再对$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi dx$分部积分得$=-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$，代入即有$\frac{d}{dt}<x>=-\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$。——这个结果可以用来解释$\frac{d}{dt}<x>=\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2dx=0$：既然$\frac{d}{dt}<1>=0$，则$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2=0$，则$\frac{d}{dt}<x>=0$？不不不，$\frac{d}{dt}<1>=0$ 似乎推不出$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2=0$。】

【然后它利用$\frac{d}{dt}<x>$得到了，<v>=<$\frac{\partial x}{\partial t}$>=$\frac{d<x>}{dt}=-\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$，于是这就有速度算符$-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}$、<p>=<mv>=m<v>=m$\frac{d<x>}{dt}=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$，和动量算符$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$。而其他所有经典的力学量，都可用 x,p 表示，于是在求 Q 的平均值时，将算符 Q(x,$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$)也夹在$\Psi^*\Psi$之间并对 dx 积分即可。然后举了个例子<T>。

另外，习题 Problem 1.7 里也有个证明题：$\frac{d<p>}{dt}=<-\frac{\partial V}{\partial x}>$，它以及<v>=$\frac{d<x>}{dt}$、<p>=m$\frac{d<x>}{dt}$，都是 Ehrenfest's theorem 的举例应用，该定理 tells us that expectation values obey classical laws】

比如定态体系的 Hamiltonian 哈密顿量 H 就属于 Q 之一：$H(x,p)=\frac{p^2}{2m}+V(x)$，$\hat{H}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}$。而$H^2$也是一个力学量 Q(x,p)。——∵可用$\hat{H}\Psi=E\Psi$证明，<H>、<$H^2$>都是个定值(如果$E$是定态的$E$的话；否则只能说<H>=$E$，而无法说<H>是个常数)：<H>=<$\hat{H}$>=$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\hat{H}\Psi dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*E\Psi dx=E\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi dx=E$(这里没有用到$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$，因而是普遍意义上的；但之后我们会发现，$\hat{H}\Psi=E\Psi$不成立，$\hat{H}\psi=E\psi$也不成立，不过对于使得$\hat{H}\Psi=E\Psi$、$\hat{H}\psi=E\psi$成立的$\Psi$、$\psi$，至少其对应的本征值

$E=<\Psi|\hat{H}|\Psi>=<\psi|\hat{H}|\psi>$是与时间无关的。)、$\hat{H}^2\Psi=\hat{H}\hat{H}\Psi=\hat{H}E\Psi=E^2\Psi$，$<H^2>=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\hat{H}^2\Psi dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*E^2\Psi dx=E^2$。那么进一步还将有 $\sigma_H=\sqrt{<H^2>-<H>^2}=0$，这意味着H没有分散/偏离平均值的机会，严格地就是 E。——所以只有定态体系的 H 才是个力学量？。

【之前我们给出过 f(x,p)=f($\hat{x}$,$\hat{p}$)，上一段却又给出了<H>=<$\hat{H}$>即 H=$\hat{H}$，这似乎意味着 Q(x,p)=Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)=$\hat{Q}$($\hat{x}$,$\hat{p}$)；但严格地来讲，一般只有 Q(x,p)≠Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)=$\hat{Q}$($\hat{x}$,$\hat{p}$)，第一个 Q 是个关于物理量 x,p 的物理量，而第二个 Q 是个函数关系，第三个 Q 是个算符；从后一个等号这个角度上，Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)=$\hat{Q}$($\hat{x}$,$\hat{p}$)，其中的 Q 代表的是函数关系，一个关于$\hat{x}$,$\hat{p}$的函数；而$\hat{Q}$表示 $\hat{x}$,$\hat{p}$的函数 Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)本身也属于一个算符$\hat{Q}$。

——但为什么又有 Q(x,p)=Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)呢？用之前的解释：因 Q 是(x,p)的函数，而对本征函数而言，x,p=$\hat{x}$,$\hat{p}$、所以 Q(x,p)=Q($\hat{x}$,$\hat{p}$)，于是对本征函数而言，$\hat{Q}$=Q】

③.Problem: given V(x)，$\Psi(x,0)=\psi(x)$；to find $\Psi(x,t)$:

a.将 V(x)代入定态薛定谔方程，解出一对对$\psi_n(x)$和对应的E_n们。

b.将$\Psi(x,0)$归一化，并用(归一化后的)初始条件$\Psi(x,0)$定$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$中的系数$c_n$们：$c_n=<\psi_n|\Psi(x,0)>$。

c.The general solution is a linear combination of separable solutions：通解$\Psi(x,t)$，是特解$\Psi_n(x,t)=\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$的线性叠加：$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$(对于非定态则止于第一个等式)。【可将其带入薛定谔方程验证$\Psi(x,t)$是否仍是它的解。或者将 n 个方程$\hat{H}\Psi_n=E\Psi_n$们分别乘上对应系数c_n并相加，看看是否有$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n$也满足$\hat{H}\Psi=E\Psi$。——但是之后我们会发现，连小ψ都根本不满足薛定谔方程。所以其实这只是量子力学的基本假设之一(但要注意，该假设是假设的Ψ的表达式，而不是ψ的)。】

由于一个特解波函数$\Psi_n(x,t)$，对应一个量子态(有着自己的能级E_n和空间上的概率分布$|\psi_n|^2$)，则该系统的几个量子态(特解)归一化($\{\psi_n\}$归一化后变成基本函数族、完备正交基，$|\psi_n|^2=1$、$|c_n|^2$变成其概率)，并线性组合后，所得的状态(总波函数)，就称为叠加态(superposition state)。

Example. 2.1 已知$\Psi(x,0)=c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)$已归一化，则$\Psi(x,t)=c_1\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+c_2\psi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$。于是$|\Psi(x,t)|^2=[c_1^*\psi_1^*e^{i\frac{E_1}{\hbar}t}+c_2^*\psi_2^*e^{i\frac{E_2}{\hbar}t}][c_1\psi_1e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+c_2\psi_2e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}]$

$=|c_1|^2|\psi_1|^2+|c_2|^2|\psi_2|^2+c_1^*c_2\psi_1^*\psi_2 e^{i\frac{E_1-E_2}{\hbar}t}+c_1c_2^*\psi_1\psi_2^*e^{-i\frac{E_1-E_2}{\hbar}t}$，因$(z_1\cdot z_2\cdot z_3)^*=z_1^*\cdot z_2^*\cdot z_3^*$，∴第四项可写作第三项的共轭，如果$c_i$,$\psi_i$是实的，则后两项可合并为$c_1c_2\psi_1\psi_2(e^{i\frac{E_1-E_2}{\hbar}t}+e^{-i\frac{E_1-E_2}{\hbar}t})$，于是$|\Psi(x,t)|^2=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos(\frac{E_1-E_2}{\hbar}t)$，其中$\frac{E_1-E_2}{\hbar}=\omega_1-\omega_2$。

这样的概率密度$|\Psi(x,t)|^2$oscillates with an angular frequency：$\omega_1-\omega_2$.但震荡部分的时间平均值=0，特别是当$\omega_1-\omega_2$很大的时候，即使不是，只要$\omega_1\neq\omega_2$，就有周期，积分上下限差取整数倍个周期 nT 并将积分结果除以 nT，或者从 0~∞的时间积分并/同样的时间，它也=0；因此$|\Psi(x,t)|^2$的时间平均值$=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2$。

上面这一段是为了贴合事实“$\frac{d}{dt}|\Psi|^2=\frac{d}{dt}|\psi|^2=0$”而篡改了真理，但是事与愿违：$|\Psi(x,t)|^2$的时间平均值≠0，所以$\Psi(x,t)$也不可能不含时。但它的空间平均值却因$\psi_1\psi_2$在对应区间上正交而=0，这与$\frac{d}{dt}<1>=\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx=0$ 非常符合——要知道，一个含时的数学表达式，对空间的积分，竟然将时间项给消去了，这是何等神奇的事情？！其实，正因时间项只存在于交叉项中，不存在于平方项中，而交叉项里空间函数是两两正交的，因此交叉项因全空间的积分=0，把时间项全带走了。

因此，对于定态的Ψ，不仅$|\Psi(x,t)|^2$与时间有关，连定态的Ψ的$|\Psi(x,t)|^2$的时间平均值，也与时间有关；不过$|\Psi(x,t)|^2$的空间平均值与时间无关。之后会有类似的、越来越多的问题，暗示我们：对于定态的含时总波函数$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$而言(不定态的话，没法谈ψ，也就没法将Ψ与ψ之比较)，$|\Psi|^2$比$|\psi(x)|^2=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+2c_1c_2\psi_1\psi_2$在交叉项中多出了一个$\cos(\frac{E_1-E_2}{\hbar}t)$因子；而$\psi^*\psi$又比<ψ|ψ>=<Ψ|Ψ>多出来了些交叉项。

二.具体的 V(x)们

1.The Infinite Square Well

①.总波函数$\Psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sin\frac{n\cdot\pi}{a}x\cdot e^{-i\frac{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}{\hbar}t}$

$V(x)=\begin{cases}0, 0\le x\le a\\ \infty, otherwise\end{cases}$：解$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\infty\psi=E\psi$得 Outside the well，$\psi(x)=0$；而 inside the well，$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi$，$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=-k^2\psi$，得 general solution 通解$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$。【这里的 k 确实是波矢：$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$】

【A,B 是实数，ψ也是实的；之后会知道，最终的通解其实是不同k_n下的它们的线性叠加，从这个角度上，这里的Bcoskx不是第二个特解，而是整个都是第一个特解。它在这里被冠名为“通解”，仅仅是在解方程的角度上，意义比较局限，解出来的仍然是整个系统的一个态，虽然只是一个态，但仍是整个系统的】

【我们设$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$，即默认了$E\geq0$，再加上后来将通解设为三角函数形式(或者$\mathrm{Ae^{ikx}+Be^{-ikx}}$是一样的)，则进一步默认了 E>0。——现在来考虑以下其他两种情况：若E=0，则ψ=A+Bx，代入边界条件$\psi(0)=\psi(a)=0$ 将得到 A=B=0，以至于ψ=0；而若 E<0，则$-\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$，$\psi=\mathrm{Ae^{kx}+Be^{-kx}}$(指数上没有 i)，结合边界条件，得到$\mathrm{e^{2ka}}=1$，于是$2\mathrm{ka}=0$、k=0，仍有ψ=0。——然而ψ=0 意味着ψ is non-normalizable，也就没有物理意义，因此无限深势阱没有 E≤0 的解。

更普遍地，书中在介绍 2.2 无限深势阱之前的 Problem 2.2，格里菲斯就已经给出了对于定态的薛定谔方程$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi$，若 E<$V_{min}$，则实的ψ无法归一化：若ψ是实的，则ψ的二阶导与ψ同号；则若某处的ψ>0，则它将随着 x→+∞凹升到+∞；即使凹着凹着穿过了 x 轴，则由于ψ开始<0，接下来会一直凸降，且不会再穿过 x 轴地一直凸到-∞】

利用 boundary conditions：$\psi(0)=\psi(a)=0$ 定系数 B,参数 k：因$\psi(0)=0$，得B=0；因$\psi(a)=0$，得 A=0 或 ka=0,±π,±2π…，但 A=0 和 k=0 对应的两个解，是 trivial solution 平庸解，这意味着带它们回$\psi(x)=\mathrm{A}\sin kx$，会得到$\psi(x)=0$，没有物理意义。

∴满足边界条件且使得解有意义的约束，只剩 ka=±π,±2π…，于是$k_n=\frac{n\cdot\pi}{a}$(n=1,2,3…；不取负值是因为提出 sin 后可放在系数 A 中，且对波函数模的平方没有影响)，又曾设 k=$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，于是联立得$\boxed{E_n=\frac{k_n^2\hbar^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}=n^2\hbar\omega$，其中$\omega=\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$。【这个结果很好记，只需要把$-\frac{\hbar^2}{2m}$的负号拿掉，再添一个$k_n^2$即可：你可以把$\psi(x)=\mathrm{A}\sin kx$带入验证；它也可由$\varepsilon=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$直接得到；而$n^2\hbar\omega$的形式是为了代入$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$后得以简化为$e^{-in^2\omega t}$】

再归一化求系数 A：$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*\Psi_n dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx=\int_0^a \mathrm{A}^2\sin^2 kx\cdot dx=\mathrm{A}^2\int_0^a\frac{1-cos2kx}{2}dx=\mathrm{A}^2\int_0^a\frac{1}{2}dx=\mathrm{A}^2\frac{a}{2}=1$，得 A=$\sqrt{\frac{2}{a}}$(不取负值是因纯粹的波函数没有意义，只有其模有意义，所以正负都一样，因而不如正，看着舒服)。【其中$\int_0^a cos2kxdx=\frac{1}{2\mathrm{k}}\int_0^{2ak}cosXdX=\frac{1}{2\mathrm{k}}\int_0^{\pm2\pi,\pm4\pi}cosXdX=0$，可以看出，为对应$\Psi_n^*\Psi_n$，该处的所有 A 都该写作$\mathrm{A}_n$，且k该写作$k_n$：当$k_n$或者说 n 取不同的值的时候，积分上限的不同理应积出不同的 A 值；所以对应不同的 n,k_n或者说E_n,ψ_n，在写通解的时候，A也该被写作A_n的，只不过这里A_n都是$\sqrt{\frac{2}{a}}$罢了。之前我们证明了各 n 下的A_n不随 t 变化，∴之后也不需要重新归一化了。】

【你或许有点纳闷，归一化的不该是总波函数$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$么，应该是$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi dx=1$而非是小波函数们$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*\Psi_n dx=1$呀：其实小波函数也代表了该系统的一个态，如果该系统只有这个态的话，它在全空间上的积分也该为 1；你说的问题将在系统是个叠加态的时候出现，此时小波函数们虽然单独在全空间上的积分=1，但分配给总波函数的概率幅会引入削减因子c_1，使得总波函数$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$处在该量子态$c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$上的可能性$c_1^2$<1(单论该量子态在全空间上的积分仍是 1，只是它只是总系统的一个分身，而不一定被总系统看上并处于其中；事实上，系统只在被测量之后才以该姿态出现)，此时$\psi_n(x)$只是个归一化好了的基矢量，而总波函数需要重新归一化！所以这是为什么我们之后将总波函数写作$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$，并先后执行了两次归一化操作。而不是将其写作$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$然后只执行一次总的归一化操作】

于是$\boxed{\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\cdot\pi}{a}x}$、$\Psi_n=\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$；$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$、$\Psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sin\frac{n\cdot\pi}{a}x\cdot e^{-i\frac{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}{\hbar}t}$。拥有最低能量$E_1$的$\psi_1$叫做基态 ground state，其他 n 的$\psi_n$叫激发态 excited states。【实际上，我觉得如果Ψ_n中时间项未将E_n展开，则ψ_n中的时间项也不该将k_n展开，等你学了固体物理你就会喜欢ω_l-q_l配对的感觉了】

注：link to《固体物理》，一维无限深势阱已经不再只具有理想/理论意义了，长出来的半导体，测出来的能谱中，能级对得可准了。现在实现无限深势阱的方法更多了：比如通过光晶格实现。

②.Ψ中的c_n由归一化后的初始总波函数$\Psi(x,0)$确定

这些Ψ_m,Ψ_n、ψ_m,ψ_n们有如下性质：

$$\begin{cases} orthogonal: <\psi_m|\psi_n>=\int\psi_m^*\psi_n dx=0, m\neq n \\ normalization: <\psi_n|\psi_n>=\int\psi_n^*\psi_n dx=1 \end{cases}$$

，<|>这样的符号与之前的<||>符号的规则和意义，都将在之后得到阐述；暂时可理解<·|·>为“内积 innerproduct”，不过之后它连同<·|·|·>，均不一定总是作为整体的符号看待，而是由右矢|>、左矢<|组合成的；而且这 4 个符号既可以表示离散点阵——矩阵(/行向量/列向量)，又可以表示连续函数，及其运算关系。【比如用$|\psi>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n|\psi_n>$来表示$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$；以及简要地推导我们将在下下一段得出的：$<\psi_m|\psi>=<\psi_m\sum_{n=1}^{\infty}c_n|\psi_n>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n<\psi_m|\psi_n>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\delta_{mn}=c_m$】

总的来说，所有无限深势阱的归一化后的解Ψ_n们，所构成的全集$\{\Psi_n\}$，(在势阱内的区间上)是 orthonormal 正交归一的，即$\boxed{<\psi_m|\psi_n>=\delta_{mn}}$，且是 complete 完备的(可作为基矢表示出任何波函数，甚至任何函数：$f(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$；因为$\{\Psi_n\}$是数学物理方法中的基本函数族之一：三角函数族)。【δ_{mn}叫 kronecker delta】

利用正交归一性(以及完备性)，可求出$c_m=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\delta_{mn}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\int\psi_m^*\psi_n dx=\int\psi_m^*\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n\,dx=\int\psi_m^*\mathrm{f(x)}dx=\langle\psi_m|\mathrm{f(x)}\rangle$。

Example. 2.2 A particle in the infinite square well has the initial wave function $\Psi(\mathrm{x},0)$=Ax(a-x); Find $\Psi(\mathrm{x,t})$.

仍然沿袭之前的步骤：

a.V(x)已经暗示是一维无限方阱，因此$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\cdot\pi}{a}\mathrm{x}$、$\mathrm{E}_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$不需计算都已熟知。

b.将 Ax(a-x)归一化，并用$\sqrt{\frac{30}{a^5}}\mathrm{x(a-x)}$定$\psi(\mathrm{x})=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$中的系数$c_n$们：$c_n=\langle\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\cdot\pi}{a}\mathrm{x}|\sqrt{\frac{30}{a^5}}\mathrm{x(a-x)}\rangle=\frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3}[1-(-1)^n]$。

c.$\Psi(\mathrm{x,t})=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}=\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\cdot\pi}{a}\mathrm{x})\cdot e^{-i\frac{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}{\hbar}t}=\sqrt{\frac{30}{a}}(\frac{2}{\pi})^3\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}(\frac{1}{n})^3\sin(\frac{n\cdot\pi}{a}\mathrm{x})\cdot e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t}$。

从该例子中可见初始条件$\Psi(\mathrm{x},0)$对于求解c_n所起到的关键作用。而有了c_n便可得到完全确定的总波函数$\Psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sin\frac{n\cdot\pi}{a}\mathrm{x}\cdot e^{-i\frac{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}{\hbar}t}$。

③.总波函数Ψ的归一化、对应本征值 E=<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2\mathrm{E}_n$

$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2=1$(这里均默认了定态，才能有$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$，但那里的这两个其实指的是$\Psi_n^*\Psi_n=\psi_n^*\psi_n$；即对于总波函数Ψ、ψ而言，不一定有该关系成立(之后我们会知道它俩在交叉项上相差了一个时间因子)。但方程两边若 innerproduct 积分一下，就成立了：可用$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}<1>=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\Psi(\mathrm{x,t})|\Psi(\mathrm{x,t})\rangle$=0 得到$\langle\Psi(\mathrm{x,t})|\Psi(\mathrm{x,t})\rangle=\langle\Psi(\mathrm{x},0)|\Psi(\mathrm{x},0)\rangle=\langle\psi(\mathrm{x})|\psi(\mathrm{x})\rangle$，该结论与定态与否无关；对于具体的问题也是这样，唯独$\Psi^*\Psi$均与时间有关；而$\langle\Psi(\mathrm{x,t})|\Psi(\mathrm{x,t})\rangle$、$\langle\psi(\mathrm{x})|\psi(\mathrm{x})\rangle$、$\psi^*\psi$三者均与时间无关)

Proof 1：$1=\langle\Psi(\mathrm{x,t})|\Psi(\mathrm{x,t})\rangle=\langle\Psi(\mathrm{x},0)|\Psi(\mathrm{x},0)\rangle=\langle\psi(\mathrm{x})|\psi(\mathrm{x})\rangle=\langle\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n|\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}c_nc_m\langle\psi_n|\psi_m\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}c_nc_m\delta_{nm}=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=n}c_nc_m=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2$。

可以证明$<\Psi_n|\Psi_m>=<\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|\psi_m e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}>=\delta_{mn}=<\psi_n|\psi_m>$，因此不需要上述$\frac{d}{dt}<1>=\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=0$，也可直接得到 $1=<\Psi|\Psi>=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}c_n c_m<\Psi_n|\Psi_m>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2$。【这一点，格里菲斯竟然没有谈，我甚是吃惊；这一点是劝退大多数人的一道坎，这个泡泡没有戳破，就永远是头上的一朵乌云：我都下可这么大的功夫，才导出了这一点】

$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2 E_n$=<H>=E(这里均默认了定态，才能有$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$；但同样，“定态的$|\Psi|^2$与 t 无关”中的$|\Psi|^2$其实是$|\Psi_n|^2$，因此似乎$|\Psi|^2$是否与 t 无关还拿不准(事实上我们已经且将要证明，对于定态的Ψ，其$|\Psi|^2$与 t 有关，不过$<\Psi|\Psi>$便与 t 无关，这与$\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=0$不允许它相和谐)。而我们似乎又无法通过$\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=0$得到$\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\hat{H}|\Psi(x,t)>=0$，以得到$<\Psi(x,t)|\hat{H}|\Psi(x,t)>=<\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)>$。——除非认为总波函数不是$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$，则才可能$\hat{H}\Psi=E\Psi$，则$<\Psi(x,t)|\hat{H}|\Psi(x,t)>$便能写成$E<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>$，则就可利用$\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=0$了。因此下面的第二个等号有点问题。我们就暂时只认为$\langle H\rangle=\langle H\rangle_\psi=<\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)>$吧。)

Proof 2：$<H>=<\Psi(x,t)|H|\Psi(x,t)>\xrightarrow{?????}<\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)>=<\psi(x)|\hat{H}\sum_{m=1}^{\infty}c_m\psi_m>$ $=<\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n|\sum_{m=1}^{\infty}c_m E_m\psi_m>=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}c_n c_m E_m<\psi_n|\psi_m>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$。

当然，其实由于$<\Psi_n|\Psi_m>=\delta_{mn}$也是正交归一的，则正统地有 $<H>=<\Psi(x,t)|H|\Psi(x,t)>=<\Psi(x,t)|H|\sum_{m=1}^{\infty}c_m\Psi_m>=<\sum_{m=1}^{\infty}c_m\Psi_m|\sum_{m=1}^{\infty}c_m E_m\Psi_m>$ $=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}c_n c_m E_m<\Psi_n|\Psi_m>=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$。【注：可证明$\Psi_n$与$\psi_n$共享同一个本征值$E_n$】

所以，这就证明了$<\Psi(x,t)|H|\Psi(x,t)>=<\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)>$。

再根据之前的定态时 H 是个力学量，有：
$\langle H\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\hat{H}\Psi dx=E\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi dx=E$，其中的Ψ是本征函数，但并不是含时的总波函数$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$。它只需 help 满足$\hat{H}\Psi=E\Psi$即可，，于是便有$\hat{H}\Psi=E\Psi$的本征值 $E=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$；以及$\langle H\rangle=<\Psi|H|\Psi>=<\psi|\hat{H}|\psi>=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{H}\psi dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*E\psi dx$ $=E\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi dx=E\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2=E$(其实不需用 Proof 1)，其中的ψ是本征函数，但并不是总波函数$\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$。它只需 help 满足$\hat{H}\psi=E\psi$即可，于是便有$\hat{H}\psi=E\psi$的本征值 $E=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$。

【Proof 2 中用到了$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，这个式子才是真正的定态的薛定谔方程——之前所引入的所有定态的薛定谔方程$\hat{H}\psi=E\psi$，其中ψ的都是指的是特解。到这里我们才能终于证明：通解/总波函数ψ并不满足定态薛定谔方程$\hat{H}\psi=E\psi$；并且类似地，定态的含时总Ψ也不满足$\hat{H}\Psi=E\Psi$：

既然ψ_n满足定态薛定谔方程，则$\hat{H}\psi=\hat{H}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n=\sum_{n=1}^{\infty}c_n E_n\psi_n$；若又设总波函数$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$满足定态薛定谔方程$\hat{H}\psi=E\psi$，则根据<H>=$E$，以及定态时<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$，得到E=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$，也就是说$\hat{H}\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n\ \psi$，于是联立两个方程，应有$\sum_{n=1}^{\infty}c_n E_n\psi_n=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n\ \psi$，但这可能么？除非$\psi_n=c_n$，此时$\psi$=1、方程两边都=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$而成立。

从另一个角度，要想$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$成立的同时，$\hat{H}\psi=E\psi$也成立，即$\hat{H}\psi=\hat{H}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n=\sum_{n=1}^{\infty}c_nE_n\psi_n=E\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n=E\psi$，则$\psi$的本征值 E=$\frac{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_nE_n}{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n}$，而又要求总波函数的本征值 E=<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$，除非有$\psi_n=c_n$，才可能有 E=$\frac{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_nE_n}{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n}=\frac{\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n}{\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$=<H>，然而$\psi_n=c_n$并不现实，但E=<H>必须满足，因此E=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$，且 E≠$\frac{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_nE_n}{\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n}$。又因$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$必然成立，则$\hat{H}\psi=E\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n\ \psi$必然不成立。

那么，现在我们肯定了两点：1.$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$即是$\hat{H}\psi=E\psi$和$\hat{H}\Psi=E\Psi$的本征值$E$，不管$\psi$、$\Psi$是什么；2.$\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$不是$\hat{H}\psi=E\psi$的本征函数$\psi$，$\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$也不是$\hat{H}\Psi=E\Psi$的本征函数Ψ。】

比如对于 Example. 2.2，$\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\left(\frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3}\right)^2=\left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^6}$，其中$\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^6}=\ \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^6}-\sum_{n=2,4,6...}^{\infty}\frac{1}{n^6}=\zeta(6)-\frac{1}{2^6}\zeta(6)=\frac{63}{64}\frac{\pi^6}{945}=\frac{\pi^6}{64\times15}=\frac{\pi^6}{960}$。这恰好就是$\left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2$的倒数，二者一乘，就验证了$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2=1$。

而$\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\left(\frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3}\right)^2\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\frac{480\hbar^2}{\pi^4ma^2}\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^4}$，其中$\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^4}=[1-\frac{1}{2^4}]\zeta(4)=\frac{15}{16}\frac{\pi^4}{90}=\frac{\pi^4}{16\times6}=\frac{\pi^4}{96}$，于是<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n=\frac{5\hbar^2}{ma^2}$，因5>≈$\frac{\pi^2}{2}$，它只比 ground state 对应的能量$E_1=\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$高那么一点点；这可通过$c_1^2=\left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2$<≈1 看出：体系处于基态的概率之大，达到了 0.998 以上，因此其对总能量的平均值的贡献占了绝大部分。

至此，有一幅更为清晰的图景普卷在我们眼前：这简直太像热统里面的系综理论了：对可观测量的测量，不是时间平均，而是系综平均——在这里，系统总哈密顿量的空间平均<H>=<Ψ|H|Ψ>，竟然走着走着(推着推着)就变成了$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$，而这家伙在含义上可不是空间平均了，这家伙就是系综平均!

不信?——来看看统计物理描绘正则系综时，所用到的热力学公式之——系统总内能 U=$\bar{E}=\sum_s P_sE_s=\sum_s\frac{e^{-\beta E_s}}{Z}E_s(=\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial(-\beta)}\sum_s e^{-\beta E_s}=-\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}Z=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z)$。只需看前半部分$\bar{E}=\sum_s P_sE_s$即可：$P_s$就是这里的$c_n^2$，而$E_s$正是这里的系统处于量子态$\Psi_n$(或者说Ψ塌缩成$\Psi_n$)时，所对应的系统的总能量$E_n$。只不过热统里的系统“很大”，对应的系综“更大”——但量子力学也能描绘多体系统，对应的波函数Ψ也很“大”（含有很多自变量/独立的广义坐标)。【怪不得学统计物理时，发现系综概念确实难接受，原来是出

自量子理论这个怪物，或者说与它有共通之处。但系综理论是 Gibbs 提出的，都是 19 世纪的古董了，比 20 世纪的量子论要早几十年，看来 Gibbs 是真正的遗世独立的天才，连哥本哈根解释都是站在了 Gibbs 这个巨人的肩膀上，有了系综这一坚实的理论，才能与爱因斯坦打持久战的。何况爱因斯坦自己都说 Gibbs 是他最佩服的人之一：他在混沌中重建了次序，辨明了真伪，整合了方方面面的真理，其功绩不在科学上，而在历史上，在对人类思考方向和能力的影响上；关于P_s：$\mathrm{F}_s=\frac{\mathrm{A}_l}{\mathrm{G}_l}=\frac{1}{e^{\alpha+\beta\mathrm{E}_l}}$，$\mathrm{P}_s=\frac{\mathrm{F}_s}{\sum_l \mathrm{A}_l}=\frac{e^{-\alpha}}{N_{imagine}}e^{-\beta\mathrm{E}_l}=\frac{e^{-\beta\mathrm{E}_l}}{\mathrm{Z}}=\frac{e^{-\beta\mathrm{E}_s}}{\mathrm{Z}}$】

对系统属性参量之 E 的每次测量，得到的值 value 都会以c_n^2的概率塌缩成对应的E_n，无论是不同时刻去测同一个系统，还是拿一堆同样的系统来同时测。——能量的加权平均(/叠加)，只是从一个侧面反映了系统总波函数是由多个小波函数线性叠加而成这个事实，毕竟 E 只是系统的众多力学量 Q 之一。从实际观测的角度，这一侧面、能量的涨落，也证实了系统所处的Ψ是一“叠加态”($\sum_n c_n\Psi_n$)这一事实。

看来这个世界的不确定性，似乎与多重宇宙的存在、物体总处于叠加态，相互印证啊；这就跟系综理论与这里的哥本哈根解释如出一辙一样。

从这里开始，我觉得我们得摒弃这样的说法了：ψ、Ψ不应被叫做“总波函数”，“总”一词着实只是为了反映了“叠加态”，但总感觉在误导人们将多个状态的波函数加起来。事实上系统在被观测时，只能以c_n^2的概率，处于其中之一Ψ_n；只是在未被观测时，才处于叠加态。所以，其实ψ、Ψ就该被称为“系统的波函数”，以反映系统未被观测时的真实状态，这个事实。

同理，不论是量子力学还是热统，H、E也不应被叫做“系统的总能量、总哈密顿量”，让人感觉系统的能量是由一份一份的小粒子能量求和而成，这就应被叫为“系统的能量”，不带任何色彩 or 偏见 or definition 地。Moreover，对力学量 H 的测量结果没有一个精确地是<H>=E=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2\mathrm{E}_n$，它是测量结果$\mathrm{E}_n$的加权平均——对总能量 H 的测量结果只可能是各个$\langle H \rangle_{\psi_n}$=<$\mathrm{H}_n$>=$\mathrm{E}_n$中的一个。

Problem. 2.5 A particle in the infinite square well has its initial wave function an even mixture of the first two stationary states: $\Psi(\mathrm{x},0)=\mathrm{A}[\psi_1+\psi_2]$

【格里菲斯在 39 页小字谈了：除了初始波函数需满足归一化条件外，对其没有任何限制。甚至其可以不连续】

a.Normalize $\Psi(\mathrm{x},0)$.

我们已经证明过<$\Psi(\mathrm{x},0)|\Psi(\mathrm{x},0)$>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2$=1，因此通过$\sum_{n=1}^{2}A^2$=1 即可得到 A=$\frac{1}{\sqrt{2}}$。这过程比 standard 答案简单多了。

b.Find $\Psi(x,t)$ and $|\Psi(x,0)|^2$.

这里就不需要c_1=<ψ_1|ψ>了，反正算出来也是c_1=c_2=A、c_3及以上=0。因此$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 e^{-i\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}+\psi_2 e^{-i\frac{4\pi^2\hbar}{2ma^2}t})=\sqrt{\frac{1}{a}}[\sin(\frac{\pi}{a}x)e^{-i\omega t}+\sin(\frac{2\pi}{a}x)e^{-i4\omega t}]=\sqrt{\frac{1}{a}}e^{-i\omega t}[\sin(\frac{\pi}{a}x)+\sin(\frac{2\pi}{a}x)e^{-i3\omega t}]=\sqrt{\frac{1}{a}}e^{-i\omega t}\{\sin(\frac{\pi}{a}x)+\sin(\frac{2\pi}{a}x)[\cos(3\omega t)-i\cdot\sin(3\omega t)]\}$。

注意先求模、再求平方：

$|\Psi(x,t)|^2=\frac{1}{a}[\sin^2(\frac{\pi}{a}x)+\sin^2(\frac{2\pi}{a}x)\cos^2(3\omega t)+2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos(3\omega t)+\sin^2(\frac{2\pi}{a}x)\sin^2(3\omega t)]=\frac{1}{a}[\sin^2(\frac{\pi}{a}x)+\sin^2(\frac{2\pi}{a}x)+2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos(3\omega t)]$。可见定态(V 与 t 无关)时，总波函数$|\Psi(x,t)|^2$竟然仍然与时间有关，一方面也说明了形式为$\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n$的$|\Psi(x,t)|^2$是含时的：$\frac{d}{dt}|\Psi|^2$≠0，且因此$|\Psi|^2$≠$|\psi|^2$——而只有$\frac{d}{dt}|\Psi_n|^2$=0、$|\Psi_n|^2$=$|\psi_n|^2$；另一方面也暗示了Ψ不满足薛定谔方程；甚者，$|\Psi(x,t)|^2$的时间平均值也含时！

这与之前 16 页的相似，$|\Psi|^2$都是以固定频率振荡，与时间有关。且<ψ|ψ>与$|\psi|^2$只相差了一个与时间无关的交叉项$\frac{1}{a}\cdot 2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$。然而，$|\Psi|^2$与$|\psi|^2$在交叉项上再差了个$\cos(3\omega t)$，使得交叉项变成了(随时间振荡的)振荡项，而<Ψ|Ψ>是对空间积分，虽然看上去将延续而不会消除该振荡项，以至于二者均与时间有关，但你可以试一试，<Ψ|Ψ>与时间无关，至少对于定态体系的、可分离变量的Ψ而言。

按理说非定态体系的<Ψ|Ψ>也应与时间无关，而不需要证明；毕竟<Ψ(x,t)|Ψ(x,t)>与时间有关，是一件非常致命的事，这意味着你需要因<Ψ|Ψ>中含有的振荡项，而无时无刻不去重新归一化系数，以抵消该变化。格里菲斯一开始就谈论了这个问题，直到最近它才变得重要起来。

c.Compute <x>,<p>.【若未说明则均是指$<x>_\Psi$,$<p>_\Psi$】

<x>=$\int_0^a x|\Psi(x,t)|^2dx$，看上去有点复杂。分成分地来捋一捋：

$\int_0^a x\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=(\frac{a}{n\pi})^2\int_0^{n\pi}(\frac{n\pi}{a}x)\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)d(\frac{n\pi}{a}x)=(\frac{a}{n\pi})^2\int_0^{n\pi}x\cdot\sin^2x\cdot dx=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^2\int_0^{n\pi}x\cdot[1-\cos(2x)]\cdot dx=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^2[\frac{(n\pi)^2}{2}-\frac{1}{4}\int_0^{2n\pi}(2x)\cos(2x)\cdot d(2x)]=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^2[\frac{(n\pi)^2}{2}-\frac{1}{4}\int_0^{2n\pi}x\cdot d\sin x]=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^2\frac{(n\pi)^2}{2}=\frac{a^2}{4}$。

那么$\int_0^a x\psi_n^2dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=\frac{a}{2}$。这个结论很有意思，以至于我都不想算$\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)dx$了：我们就此打住，不去算$<x>_\Psi$,$<p>_\Psi$，而是$<x>_{\Psi_n}$,$<p>_{\Psi_n}$。即看看当系统处于$\Psi_n$时，对应的$<x>_{\Psi_n}=\int_0^a x\psi_n^2dx=\frac{a}{2}$能导出什么结论：【注：如果$\Psi_n$是$\hat{Q}$的本征函数，则$<Q>_{\Psi_n}=<Q>_{\psi_n}$是自然而然的事情，而

$<Q>_\Psi=<Q>_\psi$却不那么好判断出来，但仍成立；——但若Ψ_n不是 Q 的本征函数，那$<Q>_{\Psi_n}=<Q>_{\psi_n}$是否还成立呢？可能对于$\hat{E}$就不成立了；而且即使算出来，也不等于$\Psi_n,\psi_n$在$\hat{H}$下的共用的本征值(单位都不同)；更别说$<Q>_\Psi=<Q>_\psi$成立的可能性了？】

类似地，$\int_0^a x^2\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=(\frac{a}{n\pi})^3\int_0^{n\pi}x^2\cdot\sin^2x\cdot dx=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^3\int_0^{n\pi}x^2[1-\cos(2x)]\cdot dx=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^3[\frac{(n\pi)^3}{3}-\frac{1}{8}\int_0^{2n\pi}(2x)^2\cos(2x)\cdot d(2x)]=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^3[\frac{(n\pi)^3}{3}-\frac{1}{8}\int_0^{2n\pi}x^2\cdot d\sin x]=\frac{1}{2}(\frac{a}{n\pi})^3[\frac{(n\pi)^3}{3}+\frac{1}{4}\int_0^{2n\pi}x\sin x\cdot dx]$，而$\int_0^{2n\pi}x\sin x\cdot dx=-\int_0^{2n\pi}x\cdot d\cos x=-2n\pi$，于是$<x^2>=\frac{a^3}{2}[\frac{1}{3}+(\frac{1}{n\pi})^3\frac{-2n\pi}{4}]=\frac{a^3}{2}[\frac{1}{3}-\frac{1}{2(n\pi)^2}]$。

(1).于是$<x^2>_{\Psi_n}=\int_0^a x^2\psi_n^2dx=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=a^2[\frac{1}{3}-\frac{1}{2(n\pi)^2}]$。

$<p>_{\Psi_n}=<mv>_{\Psi_n}=m<v>_{\Psi_n}=m\frac{d<x>_{\Psi_n}}{dt}=0$、$<p^2>_{\Psi_n}=-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}dx$，代入一维无限深势阱(井内 V=0)的定态薛定谔方程$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$（适用于特解$\psi_n$）得到$<p^2>_{\Psi_n}=2mE_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx=2mE_n=2m\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=(\frac{n\pi\hbar}{a})^2$。一方面这印证了力学量的空间平均值$<Q_n>$之$<x>_{\Psi_n}$、$<x^2>_{\Psi_n}$、$<p>_{\Psi_n}$、$<p^2>_{\Psi_n}$均不含时；另一方面，有了这四个量，便可求$\sigma_x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}=\sqrt{a^2\left[\frac{1}{3}-\frac{1}{2(n\pi)^2}\right]-\left(\frac{a}{2}\right)^2}=\sqrt{a^2\left[\frac{1}{12}-\frac{1}{2(n\pi)^2}\right]}=\frac{a}{2}\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{2}{(n\pi)^2}}$、$\sigma_p=\sqrt{<p^2>-<p>^2}=\frac{n\pi\hbar}{a}$、于是$\sigma_x\sigma_p=\frac{a}{2}\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{2}{(n\pi)^2}}\frac{n\pi\hbar}{a}=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{(n\pi)^2}{3}-2}\ge\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2}{3}-2}=1.136\cdot\frac{\hbar}{2}>\frac{\hbar}{2}$。

这就是 uncertainty principle 的一个表现。

(2).算出来$<x>_\Psi=\frac{a}{2}[1-\frac{32}{9\pi^2}\cos(3\omega t)]$，可见它比$<x>_{\Psi_n}=\frac{a}{2}$要小；另外，$<x>_\Psi$像$|\Psi|^2$一样也 oscillates in time，with the angular frequency$=3\omega=\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$、amplitude$=\frac{32}{9\pi^2}\cdot\frac{a}{2}=0.3603\cdot\frac{a}{2}<\frac{a}{2}$。

而$<p>_\Psi=m\frac{d<x>_\Psi}{dt}=\frac{32}{9\pi^2}\cdot\frac{a}{2}\cdot m\frac{d[-\cos(3\omega t)]}{dt}=\frac{16}{3\pi^2}ma\omega\cdot\sin(3\omega t)=\frac{16}{3\pi^2}ma\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}\cdot\sin(3\omega t)=\frac{8}{3}\frac{\hbar}{a}\cdot\sin(3\omega t)$。

如果要算的话，这里也应有$<H>_\Psi=<H>_\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2E_n$与时间无关；这里$<x>_\Psi$、$<p>_\Psi$与时间有关，可能是因为Ψ不是$\hat{x}$、$\hat{p}$的本征函数的缘故；正如$H$在$\hat{x}$、$\hat{p}$的本征函数的含时总波函数下的空间平均值$<H>_G$、$<H>_F$，可能也与时间有关一样。

d.if you measured the energy of this particle, what values might you get, and what is the probability of getting each of them? Find the expectation value of H. How does it compare with E_1、E_2?

这个问题独立于 b.c.两个问，只需要 a.即可得 d.的结果。you could get either $E_1=\hbar\omega$ or $E_2=4\hbar\omega$, with equal probability $c_1^2=c_2^2=A^2=\frac{1}{2}$. So <H>=$c_1^2E_1+c_2^2E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$.

而且要注意，这里的<H>即之前我们所说的<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2\mathrm{E}_n$中的<H>，原初是指$< H >_\Psi$，而不是$< H >_\psi$，不过既然二者相等，那就无可厚非了。

至此，我们已经 encounter 到了量子力学中的 3 个基本假设了，接下来还有 2 more to meet：

a.波函数公设：微观粒子量子状态可用一个波函数完全描述，该描述由波恩统计诠释。为此(为具有物理意义)波函数必须单值、连续、有界、可归一化。

b.微观粒子动力学公设：波函数按薛定谔方程随时间演化。

c.测量公设：对某个量子态进行某个力学量 Q 的测量，结果必为该力学量算符$\hat{Q}$的本征值之一$\mathrm{Q}_n=< Q >_{\psi_n}$，对应的ψ塌缩成$\psi_n$。

2.The Harmonic Oscillator

A classical harmonic oscillator's motion is governed by Hooke's law：$\mathrm{F}=-\mathrm{kx}$, together with Newton's Second Law $\mathrm{F}=\mathrm{m}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{x}}{\mathrm{dt}^2}$.

The solution is $\mathrm{x(t)=Asin}(\omega t)+\mathrm{Bcos}(\omega t)$, where $\omega=\sqrt{\frac{\mathrm{k}}{\mathrm{m}}}$. The potential energy is $\mathrm{V(x)}=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$, which graph is a parabola with $\mathrm{k}=m\omega^2>0$.

Practically any potential is approximately parabolic, in the neighborhood of a local minimum x_0: $\mathrm{V(x)}-\mathrm{V}(x_0)=\mathrm{V}'(x_0)(\mathrm{x}-x_0)+\frac{1}{2}\mathrm{V}''(x_0)(\mathrm{x}-x_0)^2+\ldots=\frac{1}{2}\mathrm{V}''(x_0)(\mathrm{x}-x_0)^2+\ldots\approx\frac{1}{2}\mathrm{V}''(x_0)(\mathrm{x}-x_0)^2$, where $\mathrm{k}=\mathrm{V}''(x_0)>0$.

【这可链接到热统中的：热动平衡判据】

The quantum problem is to solve the time-independent Schrödinger equation for the potential $\mathrm{V(x)}=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$.

①.Algebraic Method (Ladder Operators)

$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}=\frac{1}{2m}[\hat{p}^2+(m\omega x)^2]=\hat{u}^2+\hat{v}^2$，其中$\begin{cases}\hat{u}=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}\\ \hat{v}=\frac{m\omega x}{\sqrt{2m}}\end{cases}$，因$\hat{u}\hat{v}\neq\hat{v}\hat{u}$，可知$[\hat{u},\hat{v}]=\hat{u}\hat{v}-\hat{v}\hat{u}\neq0$，即$\hat{u},\hat{v}$ does not commute 不对易。再 Let $\begin{cases}\hat{a}_-=\mathrm{i}\hat{u}+\hat{v}\\ \hat{a}_+=-\mathrm{i}\hat{u}+\hat{v}\end{cases}$(a 负是正

i，a 正是负 i)，或写为$\hat{a}_\pm$=$\mp$i$\hat{u}+\hat{v}$。因$\hat{u}\hat{v}\neq\hat{v}\hat{u}$，则$\hat{a}_-\cdot\hat{a}_+$并非简单地用平方差公式=$\hat{u}^2+\hat{v}^2$=$\hat{H}$(想不到吧！数的平方差公式里竟然用到了数的乘法交换律 ab=ba!!!——如果 u,v 是物理量，则$(iu+v)(-iu+v)$因“$-ivu+iuv$=0”而=u^2+v^2，可惜现在$\hat{u}$,$\hat{v}$是含有$\hat{p}$,$\hat{x}$的算符了，而含有$\hat{p}$,$\hat{x}$的 operators 通常并不对易：$-i\hat{v}\hat{u}+i\hat{u}\hat{v}\neq0$，于是我们得重头考量它一下)。

$\hat{a}_-\hat{a}_+=\hat{u}^2+\hat{v}^2-(i\hat{v}\hat{u}-i\hat{u}\hat{v})=\hat{H}-\frac{1}{2m}[i(m\omega x)\hat{p}-i\hat{p}(m\omega x)]=\hat{H}-\frac{1}{2}\omega i[x\hat{p}-\hat{p}x]=\hat{H}-\frac{1}{2}\omega i[\hat{x},\hat{p}]=\hat{H}-\frac{1}{2}\omega i[i\hbar]=\hat{H}+\frac{1}{2}\hbar\omega$。(a 负在前，结果却又是正的/加一个$\frac{1}{2}\hbar\omega$！)其中用到了 canonical commutation relation.；或者将其表示为$\hat{H}=\hat{a}_-\hat{a}_+-\frac{1}{2}\hbar\omega$(移项后倒是同号了！)。

同理，$\hat{a}_+\hat{a}_-=\hat{H}-\frac{1}{2}\hbar\omega$(负号的引入是因为$-ivu+iuv\rightarrow i\hat{v}\hat{u}-i\hat{u}\hat{v}$)、$\hat{H}=\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2}\hbar\omega$。接着，$\hat{a}_-\hat{a}_+-\hat{a}_+\hat{a}_-=\hbar\omega$。

(1).但我们习惯于归一化该对易关系，使得$[\hat{a}_-,\hat{a}_+]=1$，这就要求$\hat{a}_-$、$\hat{a}_+$的表达式均要除以$\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}}$，于是$\begin{cases}\hat{a}_-=\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}}(i\hat{u}+\hat{v})\\ \hat{a}_+=\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}}(-i\hat{u}+\hat{v})\end{cases}$，即$\hat{a}_\pm=\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}}(\mp i\hat{u}+\hat{v})=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp i\hat{p}+m\omega x)=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x)$。而这些除以了$\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}}$的$\hat{a}_\pm$，需×$\sqrt{\hbar\omega}$才能代回原$\hat{H}=\hat{a}_-\hat{a}_+-\frac{1}{2}\hbar\omega$，于是$\hat{H}=(\hat{a}_-\hat{a}_+-\frac{1}{2})\hbar\omega$、$\hat{H}=(\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2})\hbar\omega$。

下面利用$\hat{H}\psi=E\psi$来找$\hat{a}_+$,$\hat{a}_-$的物理意义：$\hat{H}(\hat{a}_+\psi)=\hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2})(\hat{a}_+\psi)=\hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_++\frac{1}{2}\hat{a}_+)\psi=\hbar\omega\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_++\frac{1}{2})\psi=\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+-\frac{1}{2}+1)\hbar\omega\psi=\hat{a}_+(\hat{H}+\hbar\omega)\psi=\hat{a}_+(E+\hbar\omega)\psi=(E+\hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$，得到$\hat{H}(\hat{a}_+\psi)=(E+\hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$。这意味着，对于算符$\hat{H}$而言，本征函数$(\hat{a}_+\psi)$所对应的本征值为$(E+\hbar\omega)$，以称$\hat{a}_+$为 raising operator，它作用于某态(ψ)后，使得该态升一个态(变成$\hat{a}_+\psi$)，且对应的能量升一个$\hbar\omega$(这话应该倒着说，能量升了，态才升了)。

同样的道理，$\hat{H}(\hat{a}_-\psi)=(E-\hbar\omega)(\hat{a}_-\psi)$，$\hat{a}_-$为 lowering operator，二者统称 Ladder Operators。

(2).对于 ground state ψ_0，理应有$\hat{a}_-\psi_0=0$。理由是基态对应的能量已达最低，于是$\hat{a}_-\psi_0$所对应的能量不存在，因此相应的波函数$\hat{a}_-\psi_0$不存在，而最简单的一种不存在，就是=0(或=∞，但这更像高激发态对应的能量；0<∞更像是上帝对基态的能量的选择)，导致无法归一化 normalizable。

于是即$\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(i\hat{p}+m\omega x)\psi_0=0$，移项得$\hbar\frac{d\psi_0}{dx}=-m\omega x\psi_0$，即$\frac{1}{\psi_0}d\psi_0=-\frac{m\omega}{\hbar}xdx$，积分得$\ln\psi_0=-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+C$，于是$\psi_0=Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$，然后再归一化求系数 $1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_0|^2dx=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx=A^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}d(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)=A^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\pi}$，于是$A=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$。

【这可和标准正态分布$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$对比：它也表示一维的概率密度，指数中$x^2$前面的系数$\frac{1}{2}$再除以$\pi$后开根号，来作为系数，即能使得它从-∞~+∞上归一化。但这里为什么$A\neq\psi_0$的指数$\frac{m\omega}{2\hbar}/\pi$后开根号呢？——因为$|\psi_0|^2$使得指数部分的 2 消失了，归一化的不是波函数而是其平方。因此A^2作为概率的系数，才=平方后的指数中的$\frac{m\omega}{\hbar}/\pi$再开根号$=\frac{m\omega}{2\hbar}\times2/\pi$再开根号；指数$\frac{m\omega}{2\hbar}x^2=\frac{V(x)}{\hbar\omega}$无量纲，这个表达式很强啊！】

谐振子的基态波函数$\psi_0(x)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$，然后用$\hat{H}\psi_0=E_0\psi_0$来找$E_0$：并且要利用$\hat{a}_-\psi_0=0$，则选取$\hat{H}=(\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2})\hbar\omega$，因为其中的$\hat{a}_-$靠右。——于是得到$\frac{1}{2}\hbar\omega=E_0$。

那么根据$\hat{H}(\hat{a}_+\psi)=(E+\hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$，激发态波函数为$\psi_n(x)=\frac{1}{b_{n-1}}\hat{a}_+\psi_{n-1}=\frac{1}{b_{n-1}b_{n-2}}(\hat{a}_+)^2\psi_{n-1}=\ldots=\frac{1}{b_{n-1}\ldots b_0}(\hat{a}_+)^n\psi_0=A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0$(每次的$A_n=\frac{1}{b_{n-1}\ldots b_0}$都得手动再次归一化，因为即使$\psi_{n-1}$已经归一化了，由于$\hat{a}_+$的设定的局限(也已无法再优化)，$\hat{a}_+\psi_{n-1}$也只能得到未归一化的$\psi_n$，还需乘以相对于$\psi_{n-1}$中的$A_{n-1}$的修正因子$\frac{1}{b_{n-1}}$，过渡到$A_n=\frac{1}{b_{n-1}}A_{n-1}$，才能保证$A_n^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\hat{a}_+\psi_{n-1}|^2dx=1$，即才能使得$A_n\hat{a}_+\psi_{n-1}$=归一化好了的$\psi_n$；$A_0$即$(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$)，对应本征能量为$E_n=E_0+n\hbar\omega=(\frac{1}{2}+n)\hbar\omega$。【注：这里说的“归一化系数”$A_n$，是除了$\psi_0$中的$A_0=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$之外剩下的系数部分！从$A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0$中包含完整的$\psi_0$，并与$A_n$分开，就可看出。其中$A_1=\frac{1}{b_0}$。】

但对于ψ_{70}我们仍然要操作 70 次$(\hat{a}_+)^{70}\psi_0$，很麻烦；而且操作完后，还得手动归一化以得归一化系数A_n。在没有讲解析的方法时，对包含归一化系数的ψ_n除了升算符方法，我们已经无能为力了，但对归一化系数A_n我们还有一招：

(3).上上上一段我们已知ψ_0后用$\hat{H}\psi_0=E\psi_0$来找到了未知的E_0，并通过$\hat{H}(\hat{a}_+\psi)=(E+\hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$找到了$E_n$；仿照这个步骤，既然在未知$\psi_n$时却已知道$E_n$，仍然应通过$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，来得到$\psi_n$中的$A_n$。——只不过这里不应仅选用$\hat{H}=(\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2})\hbar\omega$了，而需要并用上$\hat{H}=(\hat{a}_-\hat{a}_+-\frac{1}{2})\hbar\omega$，因为我们要通过$\frac{1}{b_n}\hat{a}_+\psi_n=\psi_{n+1}$、$\frac{1}{c_n}\hat{a}_-\psi_n=\psi_{n-1}$(其中$\psi_{n-1}$、$\psi_{n+1}$均已归一化；$A_{n-1}$、$A_{n+1}$为里面的归一化系数)，即$\hat{a}_+\psi_n=b_n\psi_{n+1}$、$\hat{a}_-\psi_n=c_n\psi_{n-1}$(这俩式子比较有物理意义：因升降操作而额外引入了系数，即使我们已经尽力将$\hat{a}_+$、$\hat{a}_-$“单位化”了(之前的对易关系)，但仍然会不可避免地引入系数；看来这是上帝使然= =，very naturally)，来找b_n，代入A_n的递推公式得A_n。

于是将两个$\hat{H}$代入薛定谔方程，得到$\hbar\omega(\hat{a}_\pm\hat{a}_\mp\pm\frac{1}{2})\psi_n=E_n\psi_n$；再将$E_n$表达式代入并÷$\hbar\omega$，得$(\hat{a}_\pm\hat{a}_\mp\pm\frac{1}{2})\psi_n=n\psi_n+\frac{1}{2}\psi_n$，即有$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n=n\psi_n$、$\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n=(n+1)\psi_n$。

为了进行接下来的步骤，需证明$\hat{a}_\mp$ is the Hermitian conjugate 厄米共轭 of $\hat{a}_\pm$，——即如果将$\hat{a}_\pm$看做矩阵的话，$\hat{a}_\mp=(\hat{a}_\pm^*)^T=(\hat{a}_\pm^T)^*$。之后我们会知道，算符作为一种变换，与矩阵本是同根生。而量子力学中物理量所对应的算符，都是厄米算符，都与厄

米矩阵等价。但这里的$\hat{a}_{\pm}$并不是厄米算符，因为它的厄米共轭并不是它本身，而是对方：$\hat{a}_{\mp}$。

【在线性代数中，若沿主对角线对称的元素对满足$a_{ji}=a_{ij}^*$，则这样的元素构成的矩阵，叫厄米矩阵 Hermitian Matrix(复的共轭对称矩阵，是实对称阵的拓展；不是复的对称矩阵！复对称矩阵也不属于实对称阵的推广，它和复的反对称矩阵，均融不进这家人/这系列电视剧；正如反对称矩阵也推广为反厄米矩阵一样：对角阵→实对称矩阵→厄米、对角阵→反实对称→反厄米)。根据$a_{kk}=a_{kk}^*$，可知其主对角线的元素都是实数，剩下的元素与与其关于主对角线对称的另一元素，互为复共轭 complex conjugate，即虚部相反。

厄米矩阵的性质之一便是，$(A^*)^T=(A^T)^*=A^H=A$(上角标 H 就是 Hermitian 的意思)，以至于$(A^*)^TA=A^2$=另一个厄米矩阵，同理A^n均∈厄米矩阵；性质之二：由于它属于正规矩阵(即$A^HA=AA^H$；包括了厄米矩阵、反厄米矩阵、酉(幺正)矩阵、以及未归一化的正交阵(物理上的说法，数学上的正交都是指正交归一)$\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$&$\begin{pmatrix}2 & 2\\ -2 & 2\end{pmatrix}$等)，因此它可被酉(相似)对角化(存在酉矩阵 U(满足$U^HU=UU^H$=E，即复的正交矩阵，比如$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$、$-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i & -i\\ i & i\end{pmatrix}$)，使得$U^H$AU=$U^{-1}$AU=diag($\lambda_1$,$\lambda_2$,…,$\lambda_n$)；是正交矩阵(只说正交一般都指实的)的拓展：$U^TU=UU^T$=E、$U^T$AU=$U^{-1}$AU=diag($\lambda_1$,$\lambda_2$,…,$\lambda_n$))，且对角化后，"厄米矩阵的特征值全是实数"、"正规矩阵的特征值全是实数时，它便是厄米矩阵"，在正规矩阵的大前提下，是充要的。

以上是厄米矩阵特有的几点性质之二。而由于厄米矩阵还属于正规矩阵，因此它也有正规矩阵的 3 点性质：a.有 n 个线性无关的特征向量(满秩)b.属于不同特征值的特征向量相互正交 c.与之酉相似的矩阵也属于正规矩阵】

即要证明对于任意使得积分值存在的函数 f 和 g，有$<f|\hat{a}_{\pm}g>=<\hat{a}_{\mp}f|g>$，即$\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(\hat{a}_{\pm}g)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{a}_{\mp}f)^*gdx$。

Proof：$<f|\hat{a}_{\pm}g>=\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(\hat{a}_{\pm}g)dx=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(\mp\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}+m\omega x)g\cdot dx=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}[\int_{-\infty}^{+\infty}\mp\hbar f^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}gdx+\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(m\omega x)g\cdot dx]$，其中$\int_{-\infty}^{+\infty}f^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}gdx=\int_{-\infty}^{+\infty}f^*dg=f^*g|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}gdf^*=-\int_{-\infty}^{+\infty}g\frac{d}{dx}f^*dx$，于是原式变为$\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}[\int_{-\infty}^{+\infty}\pm\hbar g\frac{d}{dx}f^*dx+\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(m\omega x)g\cdot dx]=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty}[(\pm\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}+m\omega x)f]^*g\cdot dx=\int_{-\infty}^{+\infty}[\hat{a}_{\mp}f]^*g\cdot dx=<\hat{a}_{\mp}f|g>$。——这里要注意，$\hat{a}_{\pm}^*=[\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp i\hat{p}+m\omega x)]^*=[\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}+m\omega x)]^*=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}+m\omega x)=\hat{a}_{\pm}$。不要看着$\hat{a}_{\pm}$中有个i$\hat{p}$就觉得它是虚的，实际上由于$\hat{p}$中含i，$\hat{a}_{\pm}$是实的。而且也不要看着∓，求复共轭后，就想变成±！因此，"*"相当于只作用于了$\hat{a}_{\pm}$所作用的函数上，饶/绕过了这个算符。

In particular，设$f=\hat{a}_{\pm}\psi_n$，$g=\psi_n$，其中ψ_n为已经包含归一化系数A_n的已经归一化的波函数，而$\hat{a}_{+}\psi_n=b_n\psi_{n+1}$、$\hat{a}_{-}\psi_n=c_n\psi_{n-1}$，其中的$\psi_{n+1}$、$\psi_{n-1}$也已归一化，利

用$<\hat{a}_\pm\psi_n|\hat{a}_\pm\psi_n>=<f|\hat{a}_\pm g>=<\hat{a}_\mp f|g>=<\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm\psi_n|\psi_n>$，有$b_n^2=b_n^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{n+1}|^2dx$ $=<\hat{a}_+\psi_n|\hat{a}_+\psi_n>=<\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n|\psi_n>=<(n+1)\psi_n|\psi_n>=(n+1)^*<\psi_n|\psi_n>=n+1$，同理$c_n^2=c_n^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{n-1}|^2dx=<\hat{a}_-\psi_n|\hat{a}_-\psi_n>=<\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n|\psi_n>=<n\psi_n|\psi_n>=n$。

于是$\hat{a}_+\psi_n=b_n\psi_{n+1}=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}$，$\hat{a}_-\psi_n=c_n\psi_{n-1}=\sqrt{n}\psi_{n-1}$。即$\psi_{n+1}=\frac{1}{b_n}\hat{a}_+\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}_+\psi_n$、$\psi_{n-1}=\frac{1}{c_n}\hat{a}_-\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_-\psi_n$。将前者改写为$\psi_n=\frac{1}{b_{n-1}}\hat{a}_+\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_+\psi_{n-1}=\frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}(\hat{a}_+)^2\psi_{n-2}=\ldots=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0$。从中便可见$b_n=\sqrt{n+1}$、$c_n=\sqrt{n}$、归一化系数$A_n=\frac{1}{b_{n-1}\ldots b_0}=\frac{1}{\sqrt{n!}}$。它也可以写作$A_n=\frac{1}{c_n\ldots c_1}=\frac{1}{\sqrt{n!}}$，不过后者没有什么物理意义。

【我之后尝试着解释其物理意义，即通过以下过程来推导A_n，以尝试着用$\frac{1}{c_n\ldots c_1}$表示A_n，不过仍然没有达到目的，倒是得到了一个没啥用的式子：

或将后者改写为$\psi_n=\frac{1}{c_{n+1}}\hat{a}_-\psi_{n+1}=\frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}_-\psi_{n+1}$，却能得到$\psi_0=\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}_-\psi_1=\ldots=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_-)^n\psi_n$，即$\psi_0=A_n(\hat{a}_-)^n\psi_n$，两边乘以$(\hat{a}_+)^n$后再乘以$\frac{1}{\sqrt{n!}}$(这两句话用到了前面的结论，按理说不该出现；但其实走到$\psi_0=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_-)^n\psi_n$就已经走不下去了，因为你没法变换它以用$\psi_0$来表示$\psi_n$。)，即有$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0=\frac{1}{n!}(\hat{a}_+)^n(\hat{a}_-)^n\psi_n$，这却只能说明$(\hat{a}_+)^n(\hat{a}_-)^n\psi_n=n!\,\psi_n$，即$\psi_n=A_n^2(\hat{a}_+)^n(\hat{a}_-)^n\psi_n$。】

【题外话，这里的 n! 让人想起了热统中，经典统计里面，因全同粒子不可分辨而引入分母的 N!，比如Ω_{BE}和Ω_{FD}在经典极限条件下，便→$\frac{\Omega_{MB}}{N!}$。只不过这里的 n 是主量子数，而不是总粒子数 N。但是波函数模的平方出现了$\frac{1}{n!}$，不由得让人思绪万千：可能谐振子的每个 nth 能级都可看做 n 个能量相同且均为$\hbar\omega$的准粒子构成？！也就是声子因玻色子的全同性而引入的 n! ？！】

综上，$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0$、$\psi_0=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$，于是$\psi_n=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$。可见，谐振子的第一激发态的波函数$\psi_1=\hat{a}_+\psi_0$，其$A_1=1$，因此波函数前面的系数，除了$\hat{a}_+\psi_0$求导出来的部分，就只有$A_0=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$了。

(4).证明ψ_n is orthogonal(由于ψ_n已经 normaliszed，则也可叫 orthonormal。但我们注重证明它们互相正交)，即$<\psi_m|\psi_n>=\delta_{mn}$：

Proof： 一方面利用$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n=n\psi_n$，有$<\psi_m|(\hat{a}_+\hat{a}_-)\psi_n>=n<\psi_m|\psi_n>$；另一方面利用$<f|\hat{a}_\pm g>=<\hat{a}_\mp f|g>$以及$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_m=m\psi_m$，有$<\psi_m|(\hat{a}_+\hat{a}_-)\psi_n>=<\hat{a}_-\psi_m|\hat{a}_-\psi_n>$ $=<\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_m|\psi_n>=m<\psi_m|\psi_n>$，因此$n<\psi_m|\psi_n>=m<\psi_m|\psi_n>$，即$(m-n)<\psi_m|\psi_n>=0$，所以当 m≠n 时，$<\psi_m|\psi_n>=0$。

又因$<\psi_n|\psi_n>=1$，因此$<\psi_m|\psi_n>=\delta_{mn}$。

Example 2.5 Find the expectation value of the potential energy in the nth state (ψ_n) of the harmonic oscillator.

<V>=<$\frac{1}{2}m\omega^2x^2$>=$\frac{1}{2}m\omega^2<x^2>$，其中<·>=<·>$_{\psi_n}$=<$\psi_n$|·|$\psi_n$>=<$\psi_n$|·$\psi_n$>。对于这种涉及 x or p 的幂函数(powers of x or p)的积分 integrals，将其表示为 raising and lowering operators 的形式很有便利：

根据$\hat{a}_\pm=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp i\hat{p}+m\omega x)$，有$\hat{a}_+ + \hat{a}_- = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}m\omega x$，于是$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$；同理$\hat{a}_+ - \hat{a}_- = -\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}i\hat{p}$，得到$\hat{p}=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$。

于是$x^2=\frac{\hbar}{2m\omega}[(\hat{a}_+)^2+(\hat{a}_+\hat{a}_-)+(\hat{a}_-\hat{a}_+)+(\hat{a}_-)^2]$，则$\langle V\rangle_{\psi_n}=\frac{1}{2}m\omega^2<\psi_n|x^2\psi_n>=\frac{\hbar\omega}{4}<\psi_n|[(\hat{a}_+)^2+(\hat{a}_+\hat{a}_-)+(\hat{a}_-\hat{a}_+)+(\hat{a}_-)^2]\psi_n>$，但其中$(\hat{a}_+)^2$作用于$\psi_n$会将其升到$\psi_{n+2}$态上去(如果不考虑归一化的问题，若考虑的话，$(\hat{a}_+)^2\psi_n=\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\psi_{n+2}$，需要再对$(\hat{a}_+)^2\psi_n\times\frac{1}{\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}}$来让它归一化为$\psi_{n+2}$)，而$<\psi_n|\psi_{n+2}>=0$，同理$<\psi_n|(\hat{a}_-)^2\psi_n>=\frac{1}{\sqrt{n}\sqrt{n-1}}<\psi_n|\psi_{n-2}>=0$，因此只剩下$\langle V\rangle_{\psi_n}=\frac{\hbar\omega}{4}(<\psi_n|\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n>+<\psi_n|\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n>)=\frac{\hbar\omega}{4}(<\psi_n|n\psi_n>+<\psi_n|(n+1)\psi_n>)=\frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)=\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=\frac{1}{2}E_n$，is exactly half of the total, and the other half is kinetic，和我们经典的认识一样。

或者将其写成$(n+\frac{1}{2})\frac{1}{2}\hbar\omega$，这样让人觉得它是以$\frac{1}{2}\hbar\omega$为一份能量的。接下来的解析 Analytic 方法就用到了它。

---

②.Analytic Method (Approximation + series method)

将薛定谔方程$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$两边同时除以$\frac{1}{2}\hbar\omega$，得到$-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi=\frac{2E}{\hbar\omega}\psi$，即$-\frac{d^2\psi}{d(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}+(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2\psi=\frac{2E}{\hbar\omega}\psi$，则设$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$、$K=\frac{2E}{\hbar\omega}$表示以$\frac{1}{2}\hbar\omega$为单位的$E$的数值大小，即$E$中有多少个$\frac{1}{2}\hbar\omega$。

(1).则$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\xi^2\psi=K\psi$，$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=(\xi^2-K)\psi$，在足够远处，x 足够大，$\xi^2>>K$，此时方程近似为$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}\approx\xi^2\psi$，而该方程的近似解为$\psi\approx e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$(Check it: $\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=\frac{d}{d\xi}(\pm\xi e^{\pm\frac{\xi^2}{2}})=(\xi^2\pm1)e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}\approx\xi^2e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$)。要注意这两个≈含义和由来不同。则通解为$\psi\approx Be^{\frac{\xi^2}{2}}+Ae^{-\frac{\xi^2}{2}}$。

但当$\xi\to\infty$时，ψ应$\to0$，于是 B=0，以至于$\psi=Ae^{-\frac{\xi^2}{2}}$。因此，当 x 足够大时，解中应当含有$Ae^{-\frac{\xi^2}{2}}$，所以对于全空间上的$\psi$、即真实的$\psi(x)$，应当含有此因子$e^{-\frac{\xi^2}{2}}$(乘的形

式；或者此项(加的形式)?)，就像高数中的“常数变易法”，或者 link to “调制”、“波包”、“驻波表达式”、“振幅随时间变化”等关键词。

于是，$\psi(\xi)=h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$，将其代入未作远距离近似的薛定谔方程$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=(\xi^2-K)\psi$，则首先需要得到$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=\frac{d}{d\xi}[h(\xi)(-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}})+\frac{dh(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}]=[h(\xi)(\xi^2-1)e^{-\frac{\xi^2}{2}}+\frac{dh(\xi)}{d\xi}(-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}})]+[\frac{dh(\xi)}{d\xi}(-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}})+\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}}]=[\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi}+(\xi^2-1)h(\xi)]e^{-\frac{\xi^2}{2}}$，于是薛定谔方程变为$[\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi}+(\xi^2-1)h(\xi)]e^{-\frac{\xi^2}{2}}=(\xi^2-K)h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$。

除以$e^{-\frac{\xi^2}{2}}$得到$\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+(\xi^2-1)h=(\xi^2-K)h$，移项消去$\xi^2h$得$\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+(K-1)h=0$。这叫做 Hermite equation，它是由薛定谔方程中$\psi=he^{-\frac{\xi^2}{2}}$得来的。现在以 power series 形式展开$h(\xi)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j$，则方程中$\frac{dh}{d\xi}=\sum_{j=0}^{\infty}ja_j\xi^{j-1}=\sum_{j=1}^{\infty}ja_j\xi^{j-1}=\sum_{j=0}^{\infty}(j+1)a_{j+1}\xi^j$(但我们对它只需要第一个形式)，$\frac{d^2h}{d\xi^2}=\sum_{j=0}^{\infty}(j+1)ja_{j+1}\xi^{j-1}$ $=\sum_{j=1}^{\infty}(j+1)ja_{j+1}\xi^{j-1}=\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}\xi^j$，将$h(\xi)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j$、$\frac{dh}{d\xi}=\sum_{j=0}^{\infty}ja_j\xi^{j-1}$、$\frac{d^2h}{d\xi^2}=\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}\xi^j$代入方程即得：

$\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}\xi^j-2\xi\sum_{j=0}^{\infty}ja_j\xi^{j-1}+(K-1)\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j=0$，合并同类项$\xi^j$，得到$\sum_{j=0}^{\infty}[(j+2)(j+1)a_{j+2}-2ja_j+(K-1)a_j]\xi^j=0$，因此对于每个 j，都应有$(j+2)(j+1)a_{j+2}-2ja_j+(K-1)a_j=(j+2)(j+1)a_{j+2}-(2j+1-K)a_j=0$。

(2).从中得到递推公式 recursion formula：$a_{j+2}=\frac{2j+1-K}{(j+2)(j+1)}a_j$，于是$h(\xi)=h_{even}(\xi)+h_{odd}(\xi)=\sum_{j=0,2,4...}^{\infty}a_j\xi^j+\sum_{j=1,3,5...}^{\infty}a_j\xi^j=a_0\sum_{j=0,2,4...}^{\infty}\frac{a_j}{a_0}\xi^j+a_1\sum_{j=1,3,5...}^{\infty}\frac{a_j}{a_1}\xi^j$，其中$h_{even}(\xi)$、$h_{odd}(\xi)$分别只由$a_0$、$a_1$决定，因为$\frac{a_j}{a_1}$已由$\frac{a_{j+2}}{a_j}=\frac{2j+1-K}{(j+2)(j+1)}$决定了。

当 j→∞时，$\frac{a_{j+2}}{a_j}\to\frac{2j}{j^2}=\frac{2}{j}$；j 为偶数时，令 $m=\frac{j}{2}$，则 m→∞时，$\frac{a_{2(m+1)}}{a_{2m}}\to\frac{1}{m}$，于是$\frac{a_{2(m+1)}}{a_{2m}}\cdot\frac{a_{2m}}{a_{2(m-1)}}\cdots\frac{a_4}{a_2}\approx\frac{1}{m!}$，因此$a_{j+2}=a_{2(m+1)}\approx\frac{1}{m!}a_2=\frac{1}{(\frac{j}{2})!}a_2$、$a_j=a_{2m}\approx\frac{1}{(m-1)!}a_2=\frac{1}{(\frac{j}{2}-1)!}a_2$；j 为奇数时，令 $m=\frac{j+1}{2}$，则 m→∞时，$\frac{a_{2m+1}}{a_{2m-1}}\to\frac{1}{m}$，于是$\frac{a_{2m+1}}{a_{2m-1}}\cdot\frac{a_{2m-1}}{a_{2m-3}}\cdots\frac{a_3}{a_1}\approx\frac{1}{m!}$，$a_{j+2}=a_{2(m+1)}\approx\frac{1}{m!}a_1=\frac{1}{(\frac{j+1}{2})!}a_1$、$a_j=a_{2m}\approx\frac{1}{(m-1)!}a_1=\frac{1}{(\frac{j-1}{2})!}a_1$。【数列的后无限项决定了数列的极限存在与否，因此我们不用管前面的有限项是否准确；这里只为查看极限是否存在】

于是，$h(\xi)=\sum_{j=0,2,4...}^{\infty}a_j\xi^j+\sum_{j=1,3,5...}^{\infty}a_j\xi^j\approx a_0+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(m-1)!}a_2\xi^{2m}+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(m-1)!}a_1\xi^{2m}=a_0+(a_1+a_2)\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(m-1)!}\xi^{2m}>(a_1+a_2)\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\xi^{2m}=C\cdot e^{\xi^2}$，在ξ→∞时，不收敛。所以，for normalizable solutions, the power series must terminate. 设存在一个 highest j，即$j_{max}=n$，使得$a_{n+2}=0$，即$\frac{a_{n+2}}{a_n}=\frac{2n+1-K}{(n+2)(n+1)}=0$，得到$K=2n+$

1。当 K 为奇数时，n 为偶数，此时它只能终止偶数序列，奇数序列仍未终止，此时必须同时令a_1=0；同理，当 K 为偶数时，n 为奇数，此时它只能终止奇数序列，为了不发散/可归一化，需令a_0=0。【这其实就是数物，不该费那么多口舌的，我只是想看看这家伙是怎么新奇地解释这部分的- -】

又因 K=$\frac{2E}{\hbar\omega}$，因此E=$\frac{K}{2}\hbar\omega$=$(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$，且$n$只能取 0,1,2,3…，以使得$h_{even}(\xi)$、$h_{odd}(\xi)$中至少有一个序列能够被 kill 终了/终止，即使得 j=0,1,2…的$2j+1-K$能 meet 到 0，以至于包含$\frac{a_{n+2}}{a_n}$的$\frac{a_j}{a_0}$或$\frac{a_j}{a_1}$全=0、a_{n+2}及其之后的a_j全=0，并且因此 j 的(有效)取值上限从无上限，缩减为了 j=0,1,2…n，即只加到a_n。

(3).代K=$2n+1$入 recursion formula：a_{j+2}=$\frac{2j+1-K}{(j+2)(j+1)}a_j$=$-\frac{2(n-j)}{(j+2)(j+1)}a_j$。

若 n=0，由于 n 为偶数，则只剩下$h(\xi)$=$h_{even}(\xi)$=$a_0\sum_{j=0,2,4\dots}^{\infty}\frac{a_j}{a_0}\xi^j$，且因$a_2$及其之后的系数均=0，求和中的 j=0,1,2…只能取到 j=0(之后的$\frac{a_j}{a_0}$会因为=$\frac{a_j}{a_{j-2}}\cdot\frac{a_{j-2}}{a_{j-4}}\cdots\frac{a_2}{a_0}$含有$\frac{a_2}{a_0}$而=0)，只剩下$h(\xi)$=$a_0\xi^0$=$a_0$。之前的$\psi(\xi)$=$h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$写作$\psi_n(\xi)$=$h_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$，于是$\psi_0(\xi)$=$a_0e^{-\frac{\xi^2}{2}}$。

若 n=1，则只剩下$h(\xi)$=$h_{odd}(\xi)$，且因a_3及其之后的系数=0，求和中 j=0,1。于是剩下$h(\xi)$=$h_{odd}(\xi)$=$a_1\sum_{j=1,3,5\dots}^{1}\frac{a_j}{a_1}\xi^j$=$a_1\xi$，于是$\psi_1(\xi)$=$h_1(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$=$a_1\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$。

若 n=2，则只剩下$h(\xi)$=$h_{even}(\xi)$，且因a_4及其之后的系数=0，求和中 j=0,1,2。于是剩下$h(\xi)$=$h_{even}(\xi)$=$a_0\sum_{j=0,2,4\dots}^{2}\frac{a_j}{a_0}\xi^j$=$a_0[1-\frac{2(2-0)}{(0+2)(0+1)}\xi^2]$=$a_0(1-2\xi^2)$，于是$\psi_2(\xi)$=$h_2(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$=$a_0(1-2\xi^2)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$。

In general, if n is an even interger, $h_n(\xi)$ will involve even powers only，即$h_n(\xi)$=$h_{even}(\xi)$=$a_0(n)\sum_{j=0,2,4\dots}^{n}\frac{a_j}{a_0}\xi^j$， and odd powers only, if n is an odd interger，即$h_n(\xi)$=$h_{odd}(\xi)$=$a_1(n)\sum_{j=1,3,5\dots}^{n}\frac{a_j}{a_1}\xi^j$。对于不同的 n，选择合适的$a_0(n)$,$a_1(n)$后得到的$h_n(\xi)$，叫做 Hermite polynomials 厄米多项式$H_n(\xi)$。

按照传统 by tradition, the arbitrary multiplicative factor $a_0(n)$,$a_1(n)$ is chosen so that $H_n(\xi)$中 the coefficient of the highest power of ξ is 2^n，或者说使得多项式的最高次项为$(2x)^n$，因此$a_0(0)$=-1、$a_1(1)$=$a_0(2)$=-2、$a_1(3)$=$a_0(4)$=-12、$a_1(5)$=$a_0(6)$=-120、$a_1(7)$=$a_0(8)$= -1680、$a_1(9)$=$a_0(10)$=-30240…，相邻两类值相除，可以从中找到规律：$a_1(2i-1)$=$a_0(2i)$=$-2^i\cdot(2i-1)!!$=$-2^i\frac{(2i)!}{2^i\cdot i!}$=$-\frac{(2i)!}{i!}$(对波函数乘以一个负号不影响波函数的性质)，或者写为$a(n)$=$-\frac{(2[\frac{n+1}{2}])!}{[\frac{n+1}{2}]!}$，中括号表示取整运算。但即使这样，波函数仍然没有归一化。

The normalized stationary states for the harmonic oscillator are: $\psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)\psi_0(\xi)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$，因$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$可进一步写为$\psi_n(x)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$，其中$\psi_0(\xi)$即$\psi_0(x)$。

这与之前用升降算符表达的$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0$、$\psi_0=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$，即$\psi_n=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$比较，可得对于本征函数$\psi_0(\xi)$或者$e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$而言，$(\hat{a}_+)^n=\frac{1}{\sqrt{2^n}}H_n(\xi)$。

3.The Free Particle (which *should have been* the simplest case of all)

V(x)=0 everywhere, classically this would just mean motion at constant velocity, but in quantum mechanics, the problem is surprisingly subtle and tricky.

定态薛定谔方程 reads $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+0\psi=E\psi$，即$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=-k^2\psi$，So far it's the same as inside the infinite square well, where the potential is also zero。然而，这次的通解我们不写成三角函数形式了，而是写成$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$。不像无限深势阱，再没有 boundary conditions to 限制 k 和 E 的可能值为k_n、E_n了，自由粒子可以携带任何正的能量$E>0$(波函数≠0 可归一化+$k^2>0$ 的要求？不，设的系数$-k^2$是人为的，能量>0 为的是满足“自由粒子携带的能量>0”这一物理意义，然后才设系数为$-k^2$)。

(1).正如$e^{i(\omega t-kx)}=e^{i\omega(t-\frac{x}{\omega/k})}=e^{i\omega(t-\frac{x}{u})}$中$\frac{\omega}{k}=u$一样，$e^{i(kx-\omega t)}=e^{ik(x-ut)}$中也用到了该物理含义。

那么将加上时间项后的总波函数改写为$\Psi=Ae^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}+Be^{-ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}=Ae^{ik(x-\frac{E}{\hbar k}t)}+Be^{-ik(x+\frac{E}{\hbar k}t)}$，其中$\frac{\omega}{k}=\frac{E}{\hbar k}=\frac{E}{p}=\frac{p}{2m}=\frac{\hbar k}{2m}$，也是一种速度，叫$v_{quantum}$，只不过经典的速度满足 p=m$v_{classical}$，但这里 p=2m$v_{quantum}$，即$v_{quantum}$变成了原来$v_{classical}=\frac{p}{m}=\sqrt{\frac{2E}{m}}$的$\frac{1}{2}$：$v_{quantum}=\frac{p}{2m}=\sqrt{\frac{E}{2m}}$。【这里的$v_{quantum}$与经典速度$v_{classical}$均指大小；之所以会发生这样的情况，是因为我们用了德布罗意/波粒二象性关系+非相对论下的 E-p 关系：$\frac{\omega}{k}=\frac{\hbar\omega}{\hbar k}=\frac{E}{p}=\frac{p}{2m}=\frac{v_{classical}}{2}$；而经典$v_{classical}$完全是从波的角度导出的：$\frac{\omega}{k}=\frac{2\pi v}{2\pi/\lambda}=v\cdot\lambda=v_{classical}$，二者的差别归根结底在于德布罗意关系解释的对象是物质波、概率波，而不是纯粹的经典意义上的波和波动关系；之后格里菲斯用相速度和群速度的角度来解释，似乎更有物理意义：这里是相速度$v_{phase}=v_{quantum}$，比群速度$v_{group}=v_{classical}$要慢】

选定 waveform 波形上的一个点，也即选定了一个固定的相位 argument，即$x\pm v_{quantum}t$=C，得到该点的横坐标随时间的变化关系：$x=C\mp v_{quantum}t$。由于

$v_{quantum}$恒>0，因此$Ae^{ik(x-\frac{E}{\hbar k}t)}$因$x=C+v_{quantum}t$而随着时间 t 的增加(△t>0)，每个固定相位的点，均朝着 x 增大的方向(△x>0)，即正半轴移动。也即整个 fixed 波形朝着 x 轴正向移动，即波朝着右边传播(如果你的 x 轴方向设定朝右→的话)。

而对于$Be^{-ik(x+\frac{E}{\hbar k}t)}$，它因$x=C-v_{quantum}t$，△t>0 对应△x<0，便朝着左边传播。因此 general solution Ψ 中蕴含着朝两个方向传播的波。但我们现在人为地设定$v_{quantum}$可以<0，即$v_{quantum}=\frac{\hbar k}{2m}$中的$k=\pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$(毕竟$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$并没有限制$k$、$v_{quantum}$必须>0；一维无限深势阱中的 k 也可取负值，但之所以不取，是因为可以提到波函数 sin 前面去)，这样一开始的通解$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$就简化为了$\psi_k=A_ke^{ikx}$、$\Psi_k=A_ke^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}=A_ke^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)}$。

(2).这里将波函数ψ写成ψ_k，一方面是因为薛定谔方程解出来的是其中的一个态ψ_n，而不是总波函数ψ；另一方面对于某一确定的 k(虽然 k 可连续取值)，ψ_k态所对应的能量 E 也是固定的，这就很像定态 stationary state(准确地说，按照之后的理论，这家伙ψ_k应该叫 determinate state，是动量算符的本征函数；但其实又不像：因为它是来自薛定谔方程，来自哈密顿算符，是 H 的本征函数...——这可能是因为[p,H]=0，以至于共享一组本征函数？？哈哈，还真是，等你学完了记得回来 check it：$[\hat{H},\hat{p}]=i\hbar\frac{dV}{dx}$，而这里自由粒子处，V=const.=0，于是$[\hat{H},\hat{p}]=0$，牛牛牛！这相当于，我们刚刚验证了两个对易的算符，其本征函数共享这件事！)的第二点性质：$<E_k>=$ constant.(当然$\psi_k^*\psi_k$与时间无关也很定态，毕竟ψ_k是定态薛定谔方程的解，不过这家伙与空间位置也无关，就有点诡异了)。——当然，也要注意这里的A也应是A_k，对于不同的ψ_k，应选取相应的A_k以使得ψ_k归一化(只不过在无限深势阱处A_n都=A)。

然而该ψ is not normalizable：对于任意可连续取值的 k，都有$|A_k|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*\psi_k dx=|A_k|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx=|A_k|^2\infty\neq1$。这就说明，定态薛定谔方程解出来的$\psi_k$(即 separable solutions：$\psi_k,\varphi_k,E_k$)不能代表自由粒子的真实的态。那么自由粒子便不能处于定态，即一个自由粒子不会具有确定的能量E_k，也就不会具有确定的波矢 k 和动量。

那是不是就不能用定态的薛定谔方程，而应改用薛定谔方程呢？是不是分离变量法解出来的ψ_k们没用呢？并不是。既然单个态ψ_k无法归一化，只要使得总波函数$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$归一化不就行了！不过在以前，$\psi_n$是归一化好了的波函数、$c_n$为$\psi_n$对ψ的贡献，而这里我们该将其写为$\psi=\sum_{k=1}^{\infty}c_k\psi_k=\sum_{k=1}^{\infty}c_kA_ke^{ikx}$(但由于 k 可<0，因此求和得从-∞~+∞，且 k 不再取整数)，虽然看上去反正单个ψ_k都无法归一化、无法成为基矢，分配系数c_n也就没什么用了；但之后我们会发现，也可以选取A_k使得ψ_k狄拉克归一化，其中$A_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$。

怎么选择各个c_k来削减各子波ψ_k的振幅呢？——让$c_k=\phi(k)dk$，再加上人们选用$A_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$也是依数学的角度——于是这就成了《数物》中的复数形式的傅里叶积分：$\psi=\sum_{k=-\infty}^{\infty}c_k\psi_k=\sum_{k=-\infty}^{\infty}c_kA_ke^{ikx}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{ikx}dk=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{ikx}dk$。此时对于 appropriate $\phi(k)$，即合适的$c_k=\phi(k)dk$，总波函数ψ便是可克罗内克归一化的了。

【这里A_k中选用$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$，是因为为了让$<\psi_{k'}|\psi_k>=\delta(k-k')$中$\delta$前面的系数为 1，也就是让$\psi_k$狄拉克归一化，之后在 47、48 页会提及，其中用到了傅里叶变换，因此$|A_k|^2=\frac{1}{2\pi}$；而$\psi=<\phi(k)|\psi_k>$(其中$\phi(k)$与c_k一样是实函数)，用到的是对 k 的傅里叶积分，其前面没有系数，或者说其前面的系数是$\psi_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$中的；或者说就简单地是子波求和、积分；只有傅里叶变换前面才有系数$\frac{1}{2\pi}$】

同理，$\Psi=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\Psi_k=\sum_{k=-\infty}^{\infty}A_ke^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk$。

【同理此时Ψ也是可归一化的了，但归一化后，其各个$\phi(k)$的值，与使得ψ归一化的各个$\phi(k)$的值，在相同 k 处，是否相同呢？(This is a stupid question, originated from my sequence mistake…)即Ψ中的$\phi(k)$是否就是ψ中的$\phi(k)$呢？——由于在同一 x 处，$\Psi^*\Psi\neq\psi^*\psi$，所以没法通过$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$以使得$<\Psi|\Psi>=<\psi|\psi>$，这样$\phi(k)$可能就得不同了。——但我们不需要也没办法使得$\Psi^*\Psi=\psi^*\psi$，而且即使$\Psi^*\Psi\neq\psi^*\psi$，也有$<\Psi|\Psi>=<\psi|\psi>$满足，即二者的归一化是自然而然的，不需要在二者的$\phi(k)$上要求等或不等。

注：这里也应有$\Psi^*\Psi\neq\psi^*\psi$、$\frac{d}{dt}|\Psi|^2\neq 0$、$<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=<\psi(x)|\psi(x)>$、$\frac{d}{dt}<1>=\frac{d}{dt}<\Psi(x,t)|\Psi(x,t)>=0$ 四个(三个；后两个是一家，且其实后两个以及前两个取等时，都只适用于单态波函数。只不过到了叠加态后，前两个不再成立。而后两个仍然成立，是为了使得波恩诠释具有物理意义而不得不的)关系成立。

实际上，正如$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$、$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$对于同一个 n 都共享同一个$c_n$一样；这里的$\Psi$与$\psi$，对于同一个 k，也都共享同一个$\phi(k)$。

额，按照格里菲斯书上的顺序，这是很自然的…：得先给出$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk$，然后再$\psi(x)=\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{ikx}dk$，正如之前的$\psi(x)=\Psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$也是这样一样。因此在顺序上我得像格里菲斯那样先给出$\Psi_n(x,t)$的定义，则$\psi(x)$的表达式自然而然就推出来了。在之前我确实是这么做的，但这里我就因没有这么做而遇上了问题。】

称含时的总波函数$\Psi(x,t)$而非$\psi(x)$为 wave packet 波包，因为这样的话$\Psi(x,t)$才在传播呀，才是波呀！

(3).跟之前一样，一般的问题是，给定了初始波函数$\Psi(x,0)=\psi(x)$，如何得到(各)系数$\phi(k)$？——通过傅里叶变换：$\phi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)e^{-ikx}dx$。这跟之前的$c_n=<\psi_n|\psi>$有异曲同工之妙。只不过这里相当于$\phi_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}<e^{ikx}|\psi>=<\psi_k|\psi>$。【傅里叶变换不该是$\frac{1}{2\pi}$么，这里为啥是1呢？可能是因为$\psi$和$\psi_k$中的$A_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$提到前面去而变成了$\frac{1}{2\pi}$？之后的$c(p)=<f_p|f>$也该是$\frac{1}{2\pi}$的，但却也是 1。或许$\phi(k)$与$\psi$二者就不严格地是原函数与像函数的关系，没那么数学？】

有意思的是，对于自由粒子来说，由于$\psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{ikx}dk$是积分形式，并不像$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n$一样是求和形式，那么甚至连系数$\phi(k)$也能被写成$\psi=<\phi(k)|\psi_k>$，当然这需要提前约定内积$<\cdot|\cdot>$是对 dk 进行积分(用红色的 bracket 表示)。同理，$\Psi=<\phi(k)|\Psi_k>$。而且由于也有$<\Psi_{k'}|\Psi_k>=<\psi_{k'}|\psi_k>=\delta(k-k')$，因此也有$\phi(k)=<\Psi_k|\Psi>$。

Example. 2.6 A free particle, which is initially localized in the range -a<x<a(处于该范围内各处的几率默认是均等的), is released at time t=0：即$\psi(x,0)=\begin{cases}A, & if\ -a<x<a\\ 0, & otherwise\end{cases}$, Find $\psi(x,t)$.

a.ψ归一化得 $A=\frac{1}{\sqrt{2a}}$。

b.而$\phi_k=<\psi_k|\psi>=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}<e^{ikx}|\psi>=\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{\sin(ka)}{k}$。

c.$\Psi=<\phi(k)|\Psi_k>=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}<\phi(k)|e^{-i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}>=\frac{1}{\pi\sqrt{2a}}<\frac{\sin(ka)}{k}|e^{-i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}>$。

If a→0, sin(ka)≈ka，$\phi(k)\to\sqrt{\frac{a}{\pi}}$，与 k 无关。——这意味着当$\psi(x,0)$精确地可测时(即$\psi$、$|\psi|^2$中显著>0 的部分、对概率 1 贡献的最主要的面积，所属的 x 区间很窄，集中分布在 x=0 附近)，则k的不确定度很大(各子波的 k 在 k 空间/k 轴上平均分布，各种大小的 k，所对应的子波数量相当；虽然其实只能说各 k 子波的振幅相等，以至于振幅的平方——能量所占百分比、出现概率相等，概率也就相当于数量了；相当于c_n都是一样大的，每个能量E_n对总能量 E 的贡献、占比c_n^2同样多，则k_n也是、p_n也是。)，则 the spread in momentum $p=\hbar k$ must be large, too. 数学地来说，似乎$|\phi(k)|^2$变得像$|\psi|^2$一样，成为分布函数了(但$\phi(k)$也应归一化)，这样用$<>=<>_{\psi(x)}$算出来的$\sigma_x=\sqrt{<(x-<x>)^2>}$=很小、$<>=<>_{\phi(k)}$算出来的$\sigma_k=\sqrt{<(k-<k>)^2>}$很大。

普遍地，$\phi(k)=\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\sin(ka)}{ka}$，它在 x=0 处有最大值$\sqrt{\frac{a}{\pi}}$，在 $k=\pm n\frac{\pi}{a}$处值=0，是个周期性穿插 x 轴震荡衰减的函数、偶函数、交替地><0；其模的平方就恒>0 了，恒在 x

轴上方以递减的小山包形式衰减。【这在《信息光学基础》、信号分析中，被描绘为 sinc 函数】

If a is large, $k=\pm n\frac{\pi}{a}$会间隔很小地、密集地集中于 k=0 附近，此时$\phi(k)$ is a sharp spike about k=0. And it's got a well-defined momentum but an ill-defined position $\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2a}}$ $(-a<x<a$很宽). 而且，$\Psi=\frac{1}{\pi\sqrt{2a}}<\frac{\sin(ka)}{k}|e^{-i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}>$会在 t=0 的$|\psi(x,0)|^2$的基础上，随时间 t 演化。

【在数物中，有个类似的函数——δ函数的广义形式之一：$\delta(k)=\lim_{a\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(ka)}{k}$，不过这里的$\lim_{a\to\infty}\phi(k)=\lim_{a\to\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{\sin(ka)}{k}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\delta(k)$，使得即使 a→∞，$\phi(k)$在 k=0 处也虽→∞，但没有$\delta(k)$那么快；也就是说，在 a→∞极限下，$\phi(k)$很像$\delta(k)$，但因$\sqrt{\frac{\pi}{a}}$而比它略矮点。

而由于对于 a>0，$\int_0^\infty\frac{\sin ax}{x}dx=\int_0^\infty\frac{\sin ax}{ax}d(ax)=\frac{\pi}{2}$、因偶函数性质而$\int_{-\infty}^\infty\frac{\sin ax}{x}dx=\pi$，即对于任意 a>0，$\frac{\sin(ka)}{k}$都是可归一化的(这也是为什么要设置$\delta(x)=\lim_{a\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(xa)}{x}$前面的系数为$\frac{1}{\pi}$，以使得$\int_{-\infty}^\infty\delta(x)dx=1$)，因此$\phi(k)=\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{\sin(ka)}{k}$也是可归一化的，其归一化系数为$\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right)^{-1}=\sqrt{\frac{a}{\pi}}$，不论 a 是否→∞。因而或许$|\phi(k)|^2$也是可归一化的。】

---

(4).事实上，$v_{quantum}=\frac{v}{2}$的问题，在我们发现ψ_k不是 a physically realizable state 的同时，就已经 evaporated 消失得无影无踪——即就已经被解决了：真实的$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk$，是一个波包，and a wave packet is a superposition of sinusoidal functions whose amplitude is modulated by $\phi(k)$。也就是说，一个自由粒子Ψ是由振幅各个受$\phi(k)$调制后的$e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}$叠加而成的。

What corresponds to the particle velocity is not the speed of the individual ripples (the phase velocity), but rather the speed of the envelope (the group velocity), which depending on the nature of waves, can be greater than, less than, or equal to, the velocity of the ripples.

For waves on a string, the group velocity is the same as the phase velocity. For water waves it is one-half the phase velocity. For the wave function of a free particle in quantum mechanics, the group velocity is twice the phase velocity，即

$$v_{group}=\frac{d\omega}{dk}=\frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)}=\frac{d(\frac{p^2}{2m})}{dp}=\frac{p}{m}=2\frac{\frac{p^2}{2m}}{p}=2\frac{\hbar\omega}{\hbar k}=2\frac{\omega}{k}=2v_{phase}=2v_{quantum}=v_{classical}.$$

4.The Delta-Function Potential

①.Scattering/Bound State

在 the infinite square well 和 the harmonic oscillator 的势场中，无论粒子具有怎样的E_n，即对于任意一个确定的E_n，总存在上限x_n^+,和下限x_n^-，使得当 x>x_n^+时，V(x)>E_n；当 x<x_n^-时，V(x)>E_n。【谐振子的 V(x)=$\frac{1}{2}kx^2$在∞时也→∞】

上限x_n^+的最小值，下限x_n^-的最大值，叫做 the turning point. 在这两个 points 之间，以经典的思维来看，粒子是无法出去的。这个 region 中的粒子就处在一个 classical bound state 中.

(1).但如果该 region 只是一个局域的盆地，比如使得无限深势阱中某侧的无限大的势垒在仍保持无穷高的情况下，不再保持无穷宽，即“有限宽+无限高”：【注：这里用了“势垒”一词，比较生动形象地说明了“两边的势”相对于井内无穷高，即像垒，的同时，这却又归属于“一口井”，即本质上又归于势，的矛盾；——实际上，无限深势阱，可看将各处的 V 减去两旁无穷高的垒的高度，即井往下平移个与两边的垒等高的高度，来理解它是一口井。但数学上做不到。因此它不得不有“垒”的影子。】

那么根据量子隧穿 tunneling 效应(P322 the wkb approximation)，粒子在从高势垒的一侧，朝高势垒的另一侧方向的深入的过程中，粒子波函数的振幅随着|▵x|的增大，以 e 指数方式衰减。因此只要无限深势阱某侧不是无限宽，则粒子可逃逸出去(逃出去后振幅不为 0)。出去后也可回来(只不过振幅再次衰减相同倍数，概率更小了)。

这意味着粒子从某侧的无穷远处来到盆地里，又回到那个方向的无穷远去，这很自由(即使需要损失很多，但至少是可能的)，因此称粒子处于 scattering state。因此，此时这个 classical bound state 在量子中，便成为了 a quantum scattering state.

如果我们再将该侧的有限宽的无限高势垒，变成有限高，且高度低于 E，则这就属于 a classical scattering state 这个更 scattering 的 state 了。同理，如果再将另一侧无限宽无限高势垒，变为有限宽有限高，且高度小于 E，则这就更 scattering 了，也叫作 a classical scattering state。

(2).但如果我们设想一下将无限高势阱的某侧变为“有限高+无限宽”呢?

如果 V(x)是个常数，则若 V(x)>E，粒子波函数振幅仍然指数衰减，且衰减到无穷远后还在衰减，因此粒子仍然逃不出去。而若 V(x)<E，则这又太简单了点：这属于 a classical scattering state。

如果 V(x)不是个常数，而是刚开始比 E 高，而势垒在无穷远处的值<E，那粒子可否逃出去呢？——这就仿佛是之前的“有限宽+无限高”的势垒，它的有限宽一侧在无穷远处的 V(x)=0<E。其中的“有限宽”实际上是指 V(x)>E 的区域宽度是有限的，甚至可以间隔分布在通往无穷远的路上，只要某侧无穷远处的 V(x)<E 即可，粒子最终

总能穿透势垒。【因为你可将其想象为一个拥有 V(x)-V(∞)<E-V(∞)的新能量和新势垒的新体系，其势能 V(x)-V(∞)在某侧无穷远处的值=0，然后利用一侧“有限宽+无限高”势垒的结论】

(3).综上，在量子中(现实也是这样)：当 E 和 V 满足 E<min{V(-∞),V(+∞)}时，为(quantum) bound state；当 E 和 V 满足 E>min{V(-∞),V(+∞)}时，为(quantum) scattering state.

经典的 bound state 是局域的，量子的 bound state 是全局的。——若 Scatter 是经典的，则也一定是量子的；若 bound 是量子的，则也一定同时是经典的。经典的 bound 不一定是量子的 bound；量子的 scatter 不一定是经典的 scatter。

在现实生活中，许多 potentials go to zero at infinity, in which case the criterion simplifies even further: E<0 bound state; E>0 scattering state.

②.The Delta-Function Potential

$V(x)=-\alpha\delta(x)$，其中α>0、$\delta(x)$为 Dirac delta function，而非克罗内克 delta，因此$\delta(x)$朝上、V(x)朝下。它和无限深势阱，都是人造的势。于是定态薛定谔方程变为$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha\delta(x)\psi=E\psi$.【δ的归一化和挑选性，均在暗示δ的量纲 dimension 为$\frac{1}{\text{length}}$，又因 V 的单位为 energy，则α的单位为$\text{energy}\times\text{length}$】

可以看出此 V(±∞)→0≠∞，E 并不总是<min{V(-∞),V(+∞)}的，因此 E 的取值与 0 的比较(E<0 bound state; E>0 scattering state)便昭示着解出来的波函数是否可归一化、总波函数由定态的线性叠加，是该写成=对离散指标 n 的求和，还是=连续指标 k 的积分。

(1).先考虑 E<0 的 bound states：

分段地解薛定谔方程：x<0 时，V(x)=0，$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$，看上去这与自由粒子、无限深势阱的方程一样，但要注意那里两个地方的 E 都>0(一个是因为 E≤0 则解=0；另一个是因为需赋予自由粒子物理意义的限制)，所以接着设为了$=-k^2\psi$。但现在却因 E<0 而得设为$=\kappa^2\psi$；并且正因如此，要写为κ而不是 k，之前的系数是系数的同时也具有物理意义——波矢，但这里却没有什么物理意义，因而得设为另一个像 k 但又不是 k 的希腊字母：$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，以示“继承&发展”。

解就不是三角函数式而是指数式(不含 i)了：$\psi(x)=Ae^{-\kappa x}+Be^{\kappa x}$，在 x<0 的区间上必须使得 A=0，因此$\psi(x)=Be^{\kappa x}$(x<0)；同理在 x>0 上的解，为$\psi(x)=Fe^{-\kappa x}$(x>0).【这里的系数有点意思，A→A,B→跳过了 C,D→E 已代表能量→F,G，于是选用了

F,G，然后令 G=0，以不让ψ(x)因含有$Ge^{\kappa x}$而发散；但尚不清楚为什么不用 C,D；之后我们就知道了= =，在有限深势阱处= =】。

It remains only to stitch these two functions together, using the standard boundary conditions for ψ: 1.ψ is always continuous; 2.$\frac{d\psi}{dx}$ is continuous except at points where the potential is infinite.

In this case，通过第一个边界条件推出 F=B，于是$\psi(x)=\begin{cases}Be^{\kappa x}, x\le 0\\ Be^{-\kappa x}, x\ge 0\end{cases}$，是个偶函数 even function(不过可以简单地证明，对于一般的偶函数势 V(x),若ψ(x)是定态薛定谔方程的解，则ψ(−x)、−ψ(−x)也均分别是，因此$\psi_{\pm}(x)=\psi(-x)\pm\psi(-x)$也都是其解；因此，这种势对应的薛定谔方程，总存在这样的两个解：一个偶函数$\psi_+(x)$、一个奇函数$\psi_-(x)$。因此我们之后对待这样的问题总是设偶函数解和奇函数解，虽然只能说这两种解只是许多解之一，但他俩的线性组合便是通解了，我们要的是这一点。)。但第二点没给我们任何有用的东西——马后炮地说，它启示我们要用 delta 函数来刻画 the discontinuity in $\frac{d\psi}{dx}$，或许在定性地证明该定理的路上，就发现了定量的表达式；何况我们到现在都没用上δ(x)呢。

The idea is to 先积分 integrate $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha\delta(x)\psi=E\psi$, from $-\epsilon$ to $+\epsilon$，之后再取极限 take the limit as $\epsilon\to 0$：$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx-\alpha\psi(0)=E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx$，其中$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx=\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}d\frac{d\psi}{dx}=\frac{\partial\psi}{\partial x}|_{+\epsilon}-\frac{\partial\psi}{\partial x}|_{-\epsilon}=\vartriangle(\frac{d\psi}{dx})$，取极限后它$=\frac{\partial\psi}{\partial x}|_{0^+}-\frac{\partial\psi}{\partial x}|_{0^-}$、$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx=0$。

取极限，得到$\vartriangle(\frac{d\psi}{dx})=-\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\cdot\psi(0)$；再代入$\frac{d\psi}{dx}=\begin{cases}B\kappa e^{\kappa x}, x\le 0\\ -B\kappa e^{-\kappa x}, x\ge 0\end{cases}$、$\psi(0)=B$，得到$-2B\kappa=-\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\cdot B$。于是便有$\kappa=\frac{m\alpha}{\hbar^2}$、且$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$。求得了κ后代入ψ，归一化求系数B：$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx=2B^2\int_0^{+\infty}e^{-2\kappa x}dx=-\frac{B^2}{\kappa}e^{-2\kappa x}|_0^{+\infty}=\frac{B^2}{\kappa}=1$，得到$B=\sqrt{\kappa}=\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}$(for convenience, B 取正值)。【一般地，$\vartriangle(\frac{d\psi}{dx})=\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V\psi dx=0$，这便证明了 V(x)为有限值时，第二个边界条件成立】

将求出的κ,B代入得$\psi(x)=\begin{cases}\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}e^{\frac{m\alpha}{\hbar^2}x}, x\le 0\\ \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}x}, x\ge 0\end{cases}=\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}$，with $E=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}<0$。有意思的是，解出来 bound state 只有这一个。【按理说还得检验一下是否有 $E<V_{min}=-\infty$的，如果这样的话，E 还得舍去，因为此时ψ无法归一化。当然人家ψ可归一化，且 E 符合$>V_{min}$了(参考无限深势阱处 E 为何不能<0)。】

(2).What about scattering states, with E>0?

For x<0, $\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=-k^2\psi$，这就和自由粒子的一样了：$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$；同样 x>0 的解为$\psi=Fe^{ikx}+Ge^{-ikx}$。【若再加上时间项，$\Psi_k=A_ke^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$这就是个行走的子波了；A,F 都是向右传播的，B,G 是向左传播的】

利用 the continuity of ψ at x=0，得到 F+G=A+B；而因 $\frac{d\psi}{dx}=\begin{cases} ik(Ae^{ikx}-Be^{-ikx}), x\le 0 \\ ik(Fe^{ikx}-Ge^{-ikx}), x\ge 0 \end{cases}$，于是$\frac{d\psi}{dx}|_{0^+}=ik(F-G)$、$\frac{d\psi}{dx}|_{0^-}=ik(A-B)$，且$\psi(0)=$ A+B(=F+G)。于是利用 the discontinuity of ψ at x=0,得到 $ik(F-G-A+B)=\triangle(\frac{d\psi}{dx})=-\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\cdot\psi(0)=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+B)$。【四个未知数，两个方程】

得到$F-G=i\frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}(A+B)+(A-B)=2i\beta(A+B)+(A-B)=(2i\beta+1)A+(2i\beta-1)B=(1+2i\beta)A-(1-2i\beta)B$，where $\beta:=\frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$。【之前的$\kappa=\frac{m\alpha}{\hbar^2}$，量纲为 k 的量纲；可见β的量纲是 1】

四个未知数，两个方程，没法解。而且如果要算β中的 k，或者 k 中的 E，则一共有 5 个 unknowns；而这类似自由粒子的波函数又无法归一化，无法通过惯用的归一化来求系数；因此需要从物理意义上下手：In a typical scattering experiment, particles are fired in from one direction 比如假设从左边射入，则没有从右边入射的粒子，则 G=0。

剩下的 A 对应入射波 incident wave 的振幅；B 对应反射波 reflected wave 的振幅；F 对应透射波 transmitted wave 的振幅。【当然也可以选择 A=0，G 为入射波，F 反射，B 透射】

再设 A 已知(投掷入射波的器件铭牌上可能标明了参数= =，以至于 A 甚至 k or E 都已知；当然，其实要真投掷的话，那估计投掷的至少是个波包而不单是这里的一个小子波)，则$\begin{cases} F=(1+2i\beta)A-(1-2i\beta)B \\ F=A+B \end{cases}$，二式乘以$(1-2i\beta)$加上一式，得$(2-2i\beta)$=2A，F=$\frac{1}{1-i\beta}A$；一式减二式，得$(2-2i\beta)B=2i\beta A$，得到 B=$\frac{i\beta}{1-i\beta}A$。

即 B=$\frac{i\beta}{1-i\beta}A$，F=$\frac{1}{1-i\beta}A$；既然有意义的是波函数的模的平方，则这里的$|A|^2$、$|B|^2$、$|F|^2$等才有意义；但由于 A,B,F 对应的波函数是无法归一化的，$|A|^2$、$|B|^2$、$|F|^2$的具体值也没有意义；因此，有意义的只是它们两两之间的比值：reflection coefficient R:=$\frac{|Be^{-ikx}|^2}{|Ae^{ikx}|^2}=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{\beta^2}{1+\beta^2}=\frac{(\frac{m\alpha}{\hbar^2 k})^2}{1+(\frac{m\alpha}{\hbar^2 k})^2}=\frac{(\frac{m\alpha}{\hbar^2})^2/\frac{2mE}{\hbar^2}}{1+(\frac{m\alpha}{\hbar^2})^2/\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}{1+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}=\frac{1}{1+\frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}$，transmission coefficient T:=$\frac{|Fe^{ikx}|^2}{|Ae^{ikx}|^2}=\frac{|F|^2}{|A|^2}=\frac{1}{1+\beta^2}=1-\frac{1}{1+\frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}=\frac{1}{1+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}$。

【这看起来头头是道的，然而既然这是 free particle，我们必须用 normalizable linear combinations of the stationary states！才能 represent possible/actual particle states！因为 true physical particles are always wave packets, involving a range of energies。但这种问题最好 turn to computer.

所以 R,T 都应只是近似的、能量为 E~E+△E 的粒子的，反射和透射几率。毕竟是用简单的、单色的子波、stationary states 处理问题所得的结果。】

③.趁热打铁，来看看 a delta-function barrier (V(x)=$\alpha\delta(x)$)，**其中**α>0) **的情况：**

(1).先考虑 E<0 的 bound states：

嘿嘿，该情况不可能出现，因为此时 E<V_{min}=0，(实的)波函数无法归一化。这个在无限深势阱为什么 E 不能<0 处，已经解释过了。

因此对于δ垒，只有散射态(虽然散射态也无法归一化，但散射态的解的叠加/积分可以归一化)，连之前δ势中，唯一的束缚态都没有了。

(2).而对于 E>0 的 scattering states：

x 轴正负半轴上的波函数由于不含α也就没有变化，用到了势 V=αδ的只有第二个边界条件：$\Delta(\frac{d\psi}{dx})=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+B)$，其中的α以及之后的所有含α的量中的α都会反号。但 R,T 含有的是α^2，因此能保持不变。——这意味着，pass through the barrier 竟然与 cross over the well 一样容易(即 T 不变)!

而相比起来；经典地，粒子幻想着能穿过 barrier，连比 well 弱的几率都没有，即连可能性都没有：若 E>V_{max}，则 T=1 且 R=0，即全透过(按理说是“全都能透过”而不一定都透过；但这里的场景是从右边射粒子，因此确实是全透过)；若 E<V_{max}，则 R=1 且 T=0，即全被垒阻挡下来。

而在量子世界看来，即使 E>V_{max}，T 也<1，即 R 也>0，此时仍然有粒子被弹回来 bounce back，像δ势一样；而即使 E<V_{max}，R 也<1，即 T 也>0，仍然有粒子透射过去 passing through，而不是全反射，像δ垒一样。而且不论垒有多高，只要够薄，甚至只要不无穷宽/厚，就有机会穿过去(当然，需要满足 E>min{V(-∞),V(+∞)})，这后一个 phenomenon 叫做 tunneling.

5.The Finite Square well (the last example)

V(x)=$\begin{cases}-V_0\,, -a<x<a\\ \;\;0\,, otherwise\end{cases}$，对比无限深势阱，有两点区别：a.横向上：这家伙往左移了/或者更准确地说：朝左拓宽了 a 个单位。这下就直接变成了偶函数势 V(x)，为的就是利用相应的结论($\psi_{\pm}(x)$)，免去了设定对称部分的波函数形式和系数；b.纵向上：它两边的“垒”部分，不像无限深势阱一样是正的，它往下移到了 V=0 的水平线上，这样井底部从 0 变为了负值$-V_0$<0。这为的是使得 bound states 和 scattering states 的判断更简化：即使得 V(±∞)=0，这样判据变简单为了 E<>0。【当然，书上无限深势阱是≤≤，而这里却是<<，应该没有什么额外的暗示在里面；两种表示是等价的】

①.We'll first look at bound states (E<0)：

在 x<−a的地方，做法和 3.(1).一样：$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=\kappa^2\psi$，$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，解得 $\psi(x)=Ae^{-\kappa x}+Be^{\kappa x}$，在 x<$-a$的区间上必须使得 A=0，因此$\psi(x)=Be^{\kappa x}$(x<$-a$)；之后在 x>$a$上的解，直接因合起来两段区间上设为偶函数或者奇函数，以至于右段表达式对应为$\psi(x)=\pm Be^{\kappa x}$(x>$a$)即可，不需解该方程。【但之后我们采用的是先右段$\psi(x)=Fe^{-\kappa x}$(x>$-a$)，再左段$\psi(x)=\pm Fe^{\kappa x}$(x<$-a$)，仅仅因为偶函数的书写习惯是$\psi_+(-x)=\psi_+(x)$，而其中$\psi_+(x)$一般定义在 x 正半轴。】

在势井中，$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi=-\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi$，但由于$E+V_0$必须>0，以使得 theorem E>$V_{min}=-V_0$成立，否则将会遇上波函数无法归一化的问题(这也是为什么之前我想在δ势的 bound state 上考察一下是否有该关系恒被满足)。但这样一来，$E-V=E+V_0$>0 就像E>0 的自由粒子一样，只能设其$=-l^2\psi$(像 k，但 k 已经被用了，且物理意义上也不是 k；正如κ的创造历程一样。不过κ在数学表达式上与 k 更像一些(根号里只差了一个负号)，而l的表达式相对不太像(其实若令$E-V$=新 E，则l还是很 k 的)，因而其长相也不太像 k，就 hijkl 地用了 k 后一个字母l)，其中$l=\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$。

通解不写为 the free particle 处的$\psi=Ae^{ilx}+Be^{-ilx}$，而写为无限深势阱处的三角函数形式：$\psi(x)=A\sin lx+B\cos lx$。——这是因为，势 V(x)已经被创造成了 symmetric 偶函数的形状，而要利用奇偶性，只能用实函数(e^{ilx}的实部是个偶函数，虚部是个奇函数，等会你就得需要用$\frac{e^{ilx}+e^{-ilx}}{2}$来表示 cos 这个偶函数；有点自找麻烦)。

但是这里有意思的是，通解却用的是 C,D 当系数：$\psi(x)=C\sin(lx)+D\cos(lx)$, for $-a<x<a$。没有边界条件限制其中哪个系数要=0，但之后我们发现 Csin 项没了，这是因为为了构造全空间上的偶函数解$\psi_+(x)$的要求：$\psi_+(x)=\begin{cases}Fe^{-\kappa x}, & x>a\\ D\cos(lx), & 0<x<a\\ \psi_+(-x), & x<a\end{cases}$，当然中间那个可∈[-a,a]的，不过$\psi_+(-x)$的存在让其收敛了点(不霸占那么多空间)。

接下来也有不同：第二个边界条件不再是利用 discontinuity，而是 continuity of $\frac{d\psi_+}{dx}$：

首先 the continuity of ψ_+ at x=a：$Fe^{-\kappa a}=D\cos(la)$；其次 the continuity of $\frac{d\psi_+}{dx}$ at x=a：$-\kappa Fe^{-\kappa a}=-lD\sin(la)$。后者除以前者，得到$\kappa=l\tan(la)$：

接着令 z=la，得到$\tan(z)=\frac{\kappa}{l}=\frac{\kappa a}{z}$；而$l^2+\kappa^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$，两边乘以$a^2$以 transfer 得到$z$和$\kappa$a的第二个关系：$z^2+(\kappa a)^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$，设$z_0=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2}=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$，则 $\kappa a=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2-z^2}=\sqrt{z_0^2-z^2}$于是两方程联立，得$\tan(z)=\frac{\sqrt{z_0^2-z^2}}{z}=\sqrt{(\frac{z_0}{z})^2-1}$。

以 z 为横坐标轴，画出 y=$tan(z)$与 y=$\sqrt{(\frac{z_0}{z})^2-1}$的交点，交点的横坐标就是解。而对于后者，z=$\sqrt{\frac{z_0^2}{y^2+1}}$，这个图形就好画了：先以 y 为横轴，画个 z=$y^2+1$，再画个 z=$\frac{1}{y^2+1}$，再纵向/z 向拉伸$z_0^2$倍，再开方将幅度压缩，即得到 z=$\sqrt{\frac{z_0^2}{y^2+1}}$，它很像 z 为纵轴的标准正态分布图案；将其沿着 y=z 翻折后，其在一象限与 tanz 的交点个数，即为 bound states 个数。

如果$z_0=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$很大，即这口井 well 很宽 wide($a$>>~)，或者很深 deep($V_0$>>~)，则该“标准正态分布”图案往右凸得很多，即与 z 轴交点很靠右，这样它在 y 轴的分布也很宽，也很往上，这样与 tanz 的交点也比较靠右；则前几个解z_n分别≈$\frac{2n-1}{2}\pi$ (n=1,2,...)，即$z_1\approx\frac{\pi}{2}$、$z_2\approx\frac{3\pi}{2}$、$z_3\approx\frac{5\pi}{2}$...。于是$E-V=E_n+V_0=\frac{\hbar^2l^2}{2m}=\frac{\hbar^2(z/a)^2}{2m}\approx\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2n-1}{2a})^2\pi^2$ (n=1,2,...)。

如果$z_0=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$很小，即这口井 well 很窄 narrow ($a$<<~)，或者很浅 shallow ($V_0$<<~)，随着$z_0$的减小，交点，即 bound states 的个数会越来越少，直到当$z_0<\frac{\pi}{2}$时，tanz 只剩(第)一个分支与之有交点了。但是无论该 well 多 weak，总会至少有一个 bound state 存在。——这让我想到了δ势的 bound state，它虽无穷窄，但仍有一个 bound state 存在。当然这可能是归功于其无穷深的缘故，不然还真有可能一个 bound state 都没有。

【按理说，z_0<π时，在第一象限就已经只有一个交点了；只不过这时 z=$\sqrt{\frac{z_0^2}{y^2+1}}$可能会与 tanz 的π这支的负半轴相交；但要是考虑 y=$\sqrt{(\frac{z_0}{z})^2-1}$，则仍然没有交点。所以这里应该说$z_0<\pi$的】

得到了能量E_n，就只剩归一化ψ了。

(2).Scattering states (E>0):

一方面，由于描述 x<$-a$、x>a的自由粒子，最好利用带虚数 i 的 e 指数，而不是实的三角函数，因此这与 bound state 的同样区间上，不带虚数 i 的 e 指数解，在实虚上有所差别，进而在奇偶性上有所差别；另一方面，右侧的自由粒子的入射波 G 我们也会扔去，这样左右就更不对称 asymmetric 了，因而我们在即使势对称的 scattering states 的处理中，也不用具有奇偶性的实波函数，来作为薛定谔方程的解，以及线性叠加出总波函数的基矢。

既然不分设特解为$\psi_{\pm}(x)$了，则势阱中的解$\psi(x)=C\sin(lx)+D\cos(lx)$，其中的 C 也不能扔掉了。【解还是它，是因为方程仍然是$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi=-\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi$，而因 E>0 而$E+V_0$>0 保持不变，仍设=$-l^2\psi$】

而左右两段上的解，仍分设为入射波、反射波$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$(x<$-a$)和透射波$\psi=Fe^{ikx}$(x>a)。然后利用 x=±a两处的两个连续性边界条件，一共四个方程，用其中两个(比如后两个)，将 C and D 表示为 F 的函数，然后代入前两个方程中，得到关于 A,B,F 的两个方程，将 B,F 分别用 A 表示出来，这就回到了从前。

三.Formalism

1.Hilbert space

The natural language of quantum mechanics is $linear\ algebra\begin{cases} wave\ functions \xrightarrow{equals\ to} vectors \\ operators \xrightarrow{linear\ transformations} matrices \end{cases}$

①.数学/线代：

(1).bra 左矢<α|:= $\boldsymbol{\alpha}^H=\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \vdots \\ \alpha_N\end{pmatrix}^{T*}=(\alpha_1^* \quad \cdots \quad \alpha_N^*)$；ket 右矢|β>:= $\boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix}\beta_1\\ \vdots \\ \beta_N\end{pmatrix}$。

(2).bra(c)ket <·|·> means innerproduct：<α|β>=$\boldsymbol{\alpha}^H\boldsymbol{\beta}=(\alpha_1^* \quad \cdots \quad \alpha_N^*)\begin{pmatrix}\beta_1\\ \vdots \\ \beta_N\end{pmatrix}$=$\sum_i \alpha_i^*\beta_i$=a number。【狄拉克把 c 给弄没了】

(3).$\hat{T}=\mathbf{T}=\begin{pmatrix}T_{11} & \cdots & T_{1N}\\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{N1} & \cdots & T_{NN}\end{pmatrix}$，于是|α>=$\hat{T}$|β>即等价于$\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{T}\boldsymbol{\beta}$。

When an operator hits a vector, it delivers another vector; when a bra hits a vector, it delivers a number.因此格里菲斯认为，狄拉克提出的 bra，如果是连续函数，则最好定义为<f|=$\int f^*[\dots]dx$。且 the collection of all bras constitutes another vector space——the **dual space**.

The license to treat bras as separate entities in their own right, allows for some powerful and pretty notation.

②.物理：

需要考虑积分是否存在：

但在量子力学中，以上这些矢量大多都以函数形式$f(x)$出现，它们构成了一个无限维空间(基矢f_n像ψ_n一样，其中的 n 没有上限，即f_n有无穷多个)，所以下角标 N 应该→∞，对应的求和也将变成积分。但积分与无穷级数求和，收敛条件较为苛刻，需要考虑其值存在与否(不像有限级数的求和，就是收敛的)。

为什么要使积分存在(为了找ψ所在的空间)：

这些f所构成的空间太大，ψ只属于其中的一小部分，而我们只关心ψ们所在的空间，现在我们利用条件限制来寻找这个空间：a.为保证两两ψ之间的内积，以及与内积相关的 arguments 的存在，波函数ψ与自己的内积必须收敛。b.To represent a possible physical state, the ψ(或者说表示ψ的某个或某些 vectors f)must be normalized。这样一来，ψ便只能是f(构成的空间)中的一部分：

如何使积分存在(充要条件)：

由于ψ需要归一化，则构成ψ的f要实现“可归一化”——其充要条件便是平方可积：即存在一个有限的常数 A，使得$\int_a^b|\psi|^2dx=|A|^2\int_a^b|f|^2dx=1$，即$\int_a^b|f|^2dx=\frac{1}{|A|^2}=C$，C 是一个非零的有限常数。

C≠0 意味着f不能是 0，否则 A=∞也无法使得 f 归一化；C≠∞意味着$|f|^2$的积分不能是∞，否则即使 A=0 也无法使得 f 归一化。

ψ所在的空间：

综上，the set of all **square-integrable functions** $f(x)$ constitutes a (much smaller) vector space. Mathematicians call it $L_2(a,b)$; physicists call it **Hilbert space**. Thus, $\boxed{\text{Wave functions } \psi(x) \text{ live in Hilbert space}}$.

可以这么说，归一化或尚未归一化的、平方可积的 f 们，构成了ψ们所在的空间；而每个ψ，可看做由 f 的线性叠加，且再归一化后，所得的函数。

准确地说，a Hilbert space is a **complete inner product space**，以上平方可积的函数生成的空间，只是它的一个子空间、一个 example 而已。比如还有有限维的 vector space 们，它们生成的空间，都是/属于一个 Hilbert space。

对 Hilbert space 中的函数f的一些运算的符号的定义：

a.两个函数在区间[a,b]上的内积定义为：$\langle f|g\rangle:=\int_a^b f^*g\,dx$；

b.Schwarz inequality：同一积分区间上，$|\langle f|g\rangle|\le\sqrt{\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle}$；用到了 c。

可以这么证明：设$|h\rangle=|g\rangle-\frac{\langle f|g\rangle}{\langle f|f\rangle}|f\rangle$，则$\langle h|h\rangle=\langle h|g\rangle-\frac{\langle f|g\rangle}{\langle f|f\rangle}\langle h|f\rangle\ge0$，而其中$\langle h|g\rangle^*=\langle g|h\rangle=\langle g|g\rangle-\frac{\langle f|g\rangle}{\langle f|f\rangle}\langle g|f\rangle=\langle g|g\rangle-\frac{\langle f|g\rangle\langle f|g\rangle^*}{\langle f|f\rangle}=\langle g|g\rangle$

$-\frac{|<f|g>|^2}{<f|f>}$=实数，因此$<h|g>^*$=$<h|g>$；同理$<h|f>^*=<f|h>=<f|g>-\frac{<f|g>}{<f|f>}<f|f>$=0，于是$<h|f>^*$=$<h|f>$=0；后者、前者分别先后代入，得到$<h|h>$=$<h|g>$=$<h|g>^*=<g|g>-\frac{|<f|g>|^2}{<f|f>}$≥0，得到$<g|g><f|f>\geq|<f|g>|^2$

c.$<f|g>^*$=$(\sum_i f_i^* g_i)^*$=$\sum_i (f_i^* g_i)^*$=$\sum_i g_i^* f_i$=$<g|f>$；

d.$<f_m|f_n>$=δ_{mn}。该式包含了对 normalized、orthogonal、orthonormal 的定义.

e.对完备性的定义：a set of functions is complete if any other function can be expressed as a linear combination of them：$\begin{cases} f=\sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n \\ c_n=<f_n|f> \end{cases}$。

2.Observables

①.Hermitian Operators

系统处于某态时，某属性 Q 的空间平均值：

<Q>=$\int Q|\psi|^2 dx$=$\int \psi^* \hat{Q}\psi dx$=$<\psi|\hat{Q}|\psi>$=$<\psi|\hat{Q}\psi>$，其中的$<\psi|\hat{Q}|\psi>$你可看做由两部分相乘而成：“左矢$<\psi|$”与“一个矩阵/算符$\hat{Q}$作用于一个右矢$|\psi>$，所得的结果$\hat{Q}|\psi>$”之积。——当然也可将$\hat{Q}$算进$|\psi>$中，$|\hat{Q}\psi>$，即$\hat{Q}|\psi>$的作用结果就是另一个矢量$|\hat{Q}\psi>$：$\hat{Q}|\psi>$=$|\hat{Q}\psi>$，然后再将二者$<\psi|$、$|\hat{Q}\psi>$相乘，只不过此时中间的那两根线就变为了一根：$<\psi|\hat{Q}\psi>$。【矩阵(对 Q 而言)写法就常常用$<f_m|\hat{Q}_{mn}|g_n>$】

而由于 the outcome of a measurement has got to be real, so <Q>=$<Q>^*$，又因为性质 c.$<f|g>^*$=$<g|f>$，求复共轭 complex conjugate=交换位置 reverse the order：得到$<\psi|\hat{Q}\psi>$=$<\hat{Q}\psi|\psi>$。【这里先暂时不要理解为$\hat{Q}$从右矢中移到了左矢，而是“$\hat{Q}\psi$”整个地与“ψ”调换位置】

显然$\hat{Q}$对 helbert 空间中其他所有 f 也有上式成立：$<f|\hat{Q}f>$=$<\hat{Q}f|f>$，我们就称这些算符是厄米的 hermitian。其实需要更强的限制$<f|\hat{Q}g>$=$<\hat{Q}f|g>$，才能称之为厄米的，虽然后者物理意义并不明显，而且其实这两个条件是等价的：后者也能够在 Hilbert 空间中被推导出来：

设 c 为任意复数，f,g像h一样是 hilbert 空间的函数。由于$\hat{Q}$是由$\hat{x}$,$\hat{p}$生成的算符，故也是线性的，则$<h|\hat{Q}h>$=$<f+cg|\hat{Q}(f+cg)>$=$<f|\hat{Q}(f+cg)>$+$c^*<g|\hat{Q}(f+cg)>$=$<f|\hat{Q}f>$+$c<f|\hat{Q}g>$+$c^*<g|\hat{Q}f>$+$c^*c<g|\hat{Q}g>$；同理$<\hat{Q}h|h>$=$<\hat{Q}(f+cg)|f+cg>$=$<\hat{Q}f|f>$+$c<\hat{Q}f|g>$+$c^*<\hat{Q}g|f>$+$c^*c<\hat{Q}g|g>$。

将 3 组蓝色量两两对应等起来，得到$c<f|\hat{Q}g>+c^{*}<g|\hat{Q}f>=c<\hat{Q}f|g>+c^{*}<\hat{Q}g|f>$，于是分别设 c=1 和 c=$i$，即有$<f|\hat{Q}g>+<g|\hat{Q}f>=<\hat{Q}f|g>+<\hat{Q}g|f>$，以及$i<f|\hat{Q}g>-i<g|\hat{Q}f>=i<\hat{Q}f|g>-i<\hat{Q}g|f>$，让第一个乘以$i$后加上第二个方程，即得到$<f|\hat{Q}g>=<\hat{Q}f|g>$。

一般地，满足$<f|\hat{Q}g>=<\hat{Q}^{+}f|g>$的$\hat{Q}^{+}$，称为$\hat{Q}$的 hermitian conjugate，这个我们遇见过，在之前讲厄米矩阵的时候遇见过这个单词。注意，这只是个关系，就像f的反函数f^{-1}一样。很容易看出，当$\hat{Q}$是个厄米的算符时，$<f|\hat{Q}g>=<\hat{Q}f|g>$，则$\hat{Q}=\hat{Q}^{+}$；反过来说，当一个算符等于它的厄米共轭时($\hat{Q}=\hat{Q}^{+}$)，该算符就是个厄米算符，或者说就是厄米的($<f|\hat{Q}g>=<\hat{Q}f|g>$)。【厄米算符就像是一个等于自身的反函数的函数$f=f^{-1}$一样】

由于厄米算符的期望值是实数，所以 Observables are represented by Hermitian operators.【充要条件】

②.Determinate States (**定态在定义上的延拓，不再只针对** H，**而是任意** Q)

当你测量一个可观测量 Q 时，虽然体系一直处在ψ(Ψ)态上，但正如$<H>_{\Psi}=<H>_{\psi}$=<H>=$\sum_{n=1}^{\infty}c_n^2\mathrm{E}_n$一样，你会得到不同的值。这实际上是因为ψ态是个叠加态，若被测量，则以c_n^2的几率塌缩于定态ψ_n上，也就会以c_n^2的几率得到测量值E_n。当然如果不是定态的线性叠加ψ(比如是含时波函数的解$\Psi=\sum_n c_n\Psi_n$，此时就没有ψ一说了，也没有$<H>_{\psi}$、$<H>_{\psi_n}$一说了；就只有$<H>_{\Psi}$、$<H>_{\Psi_n}$一说了)，则<Q>更变幻莫测、无法预测了。

但当体系处在某一定态 stationary state ψ_n上时，你测量该体系的总能量则只会得到E_n，即$<H>_{\psi_n}=\mathrm{E}_n$。Stationary states are determinate states of the Hamiltonian H——定态们就是 H 的 Determinate States，可见这里所说的 Determinate States 包含了 Stationary states：定态只是针对 H 而言，而 H 是茫茫 Q 中的一员，而 Determinate States 描绘的是 Q 的一个个“定态”们。

当体系处于 Q 的一个确定态 Determinate State ψ_i(与ψ_n不同)中/上时，测量 Q 所得的结果$<\mathrm{Q}_i>=<Q>_{\psi_i}$应仅仅严格地$=\mathrm{q}_i$，这里的$\mathrm{q}_i$就相当于定态中的$\mathrm{E}_n$，是本征函数$\psi_i$在算符/矩阵$\hat{Q}$下的本征值——这意味着每个本征函数都对应一个确定态。但是否所有定态都在本征函数中呢？——我们可以这样证明该说法：

既然$<Q>_{\psi_i}$严格地$=\mathrm{q}_i$毫无波动，则$\sigma_{\mathrm{Q}_i}^2=<(\hat{Q}-<Q>_{\psi_i})^2>_{\psi_i}=<(\hat{Q}-\mathrm{q}_i)^2>_{\psi_i}=<\psi_i|(\hat{Q}-\mathrm{q}_i)^2\psi_i>=<(\hat{Q}-\mathrm{q}_i)\psi_i|(\hat{Q}-\mathrm{q}_i)\psi_i>=0$，其中利用到了$\hat{Q}-\mathrm{q}_i$也是个厄米算符。

而要想波函数与自己的内积=0，波函数只能=0，于是即有$(\hat{Q}-q_i)\psi_i$=0，得到$\hat{Q}\psi_i=q_i\psi_i$。这就是 the **eigenvalue equation** for the operator $\hat{Q}$. ψ_i is **one of eigenfunctions** of $\hat{Q}$. q_i is the corresponding **eigenvalue**.

而 Q 的各个本征函数ψ_i们，就是确定态们。或者说，Determinate states are eigenfunctions ψ_i of $\hat{Q}$。【应该说这里证明的是“确定态”在本征函数之中，而不会在其之外；但本征函数是否都是确定态呢——即某一物理量的以本征函数来求空间平均值，所得结果是否都是相应本征值呢？是的，这个结论也很重要，之前我们也见过许多次了，证明很容易，求个空间平均值就出来了。】

The collection of all the eigenvalues of an operator is called its **spectrum** 谱.有时候，多个线性无关的本征函数拥有同一个本征值。那种情况下，the spectrum is said to be degenerate，即谱中的这几个q_i，被称为是简并的。

3.Eigenfunctions of a Hermitian operator

①.Discrete Spectra

The normalizable eigen functions of a Hermitian operator $\hat{Q}$ have two important properties:

Theorem 1: Their(f_i's、Q's) eigenvalues are real.

根据厄米算符$\hat{Q}$的定义，有$<f_i|\hat{Q}f_i>=<\hat{Q}f_i|f_i>$，而根据$\hat{Q}\psi_i=q_i\psi_i$($f_i$与$\psi_i$之间只差一个常数，因此它也是$\hat{Q}$的本征函数)，有$<f_i|q_if_i>=<q_if_i|f_i>$，即$q_i<f_i|f_i>=q_i^*<f_i|f_i>$。而因大条件是$f_i$可归一化，所以它≠0，则$<f_i|f_i>\neq0$，则$q_i=q_i^*$。 QED

Theorem 2: Eigenfunctions belonging to distinct eigenvalues(q_is) are orthogonal.

根据厄米算符$\hat{Q}$的等价说法，有$<f|\hat{Q}g>=<\hat{Q}f|g>$，再根据$\hat{Q}\psi_i=q_i\psi_i$、$\hat{Q}\psi_j=q_j\psi_j$，有$q_i<f_j|f_i>=<f_j|\hat{Q}f_i>=<\hat{Q}f_j|f_i>=q_j^*<f_j|f_i>$，小条件为$q_i\neq q_j$，于是$q_i\neq q_j=q_j^*$，于是$<f_j|f_i>=0$ (既然f_j,f_i是存在于希尔伯特空间里，则这两个函数的内积是存在的；且因q_i,q_j都是实的，则若$q_i\neq q_j$，则$q_i\neq q_j^*$，必导致$<f_j|f_i>=0$；而如果q_i,q_j是虚的，小条件$q_i\neq q_j$无法推出$q_i\neq q_j^*$，也就不会导致$<f_j|f_i>=0$；不过即使二者是复数且不等$q_i\neq q_j^*$，则仍可推出$<f_j|f_i>=0$，只从是数学上地)。 QED

②.Continuous Spectra

由于此时波函数已经不可归一化了，内积$<f_i|f_i>$、$<f_j|f_i>$等不存在了，定理 1,2 就 fail 了，但既然行波波函数 reality, orthogonal, completeness still hold，则仍应满足上述结论。最好用实际的例子来解决这个小问题：

Example.3.2 Find the eigenfunctions and eigenvalues of the momentum operator.

本征方程$-i\hbar\frac{d}{dx}f_p(x)=pf_p(x)$，the general solution is $f_p(x)=Ae^{i\frac{p}{\hbar}x}$，这其实就是自由粒子处的$\psi_k=A_k e^{ikx}$，那里的 k 与这里的 p 都是连续的。

根据常数 A 的傅里叶变换：$\mathcal{F}[A]=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}A\cdot e^{-ik\xi}\cdot d\xi=\frac{A}{2\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{e^{-ik\xi}-e^{ik\xi}}{-ik}=\frac{A}{2\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{-2i\sin(k\xi)}{-ik}=\frac{A}{\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{\sin(k\xi)}{k}=A\delta_1(k)$，这里用到常数 1 的傅里叶变换，有$<f_{p'}|f_p>=\int_{-\infty}^{\infty}f_{p'}^*(x)f_p(x)\cdot dx=|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{p'}{\hbar}x}e^{i\frac{p}{\hbar}x}\cdot dx=2\pi\hbar|A|^2\cdot\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(p'-p)\frac{x}{\hbar}}\cdot d(\frac{x}{\hbar})=2\pi\hbar|A|^2\delta(p'-p)$【注：δ函数是偶函数，因此$\delta(p-p')=\delta(p'-p)$】，令$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$，通解变为$f_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}$，且$<f_{p'}|f_p>=\delta(p'-p)$。

这与真正的 orthonormality 有点像，但这里的δ是 Dirac delta，不是 Kronecker delta。因此这里称之为 Dirac orthonormality。

该 eigenfunctions 也是完备的：$f(x)=<c_p|f_p(x)>=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}<c(p)|e^{i\frac{p}{\hbar}x}>$。这里也需约定内积$<\cdot|\cdot>$是对 dp 进行积分，这其实就是傅里叶积分，连系数都是一样的，为 1。

其中$<f_{p'}|f>=<f_{p'}|<c(p)|f_p>>=<c(p)|<f_{p'}|f_p>>=<c(p)|\delta(p'-p)>=c(p')$，其中红色 bracket 是对动量 p 积分，黑色 bracket 是对坐标 x 积分。即系数$c(p)=<f_p|f>$。

这很像傅里叶变换，但系数里差了一个$\frac{1}{2\pi}$，这是因为f_p中的常数A的关系：$<f_{p'}|f_p>$本身因傅里叶变换而$=2\pi\hbar|A|^2\delta(p'-p)$的，或者说$\frac{1}{2\pi}<f_{p'}|f_p>=|A|^2\delta(\frac{p'-p}{\hbar})$才是其原本的模样。因此$<f_{p'}|f>$中也因$f$含有A们而移出来后构成了前面原本的$\frac{1}{2\pi}$，以至于$=c(p')$。——或者，$f(x)$与$c(p)$并非完全是数学上的原函数与像函数的关系：$c(p)=<f_p|f>$和$f(x)=<c(p)|f_p>$都是通过不同位置(处于左矢或右矢中的)$f_p$来积分的，而数学上是通过$e^{\pm ikx}$来积分的，差了一个$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$。【这个“或者”是我当时很犹豫所写下的，观念仍然比较保守，不敢往前走；但其实破折号前面那句话是对的，参见《信息光学》基础，后面这句话就不用思量了】

这与之前的$\phi(k)=<\psi_k|\psi>$、$\psi=<\phi(k)|\psi_k>$在系数$\phi(k)$上差了一个$\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$。

Example.3.3 Find the eigenfunctions and eigenvalues of the position operator.

写$\hat{x}f_x(x)=xf_x(x)$不咋好把！首先本征值得像 p 一样改成(与 x 一样)同样表示坐标的 y，这样f_p得改成f_y，并且我们将其写作g_y，以显示与f在函数上的不同。于是得到$\mathrm{x}g_y(\mathrm{x})=yg_y(x)$，但这里$y$因是 x 的本征值，而是一个固定的常数(对于某个本征函数g_y而言)。

该方程的解即 x=y 或者$g_y(x)$=0；或者说，当 x≠其本征值 y 时，$g_y(x)$必须恒=0 以保证等式成立；而只有当 x=y 时，$g_y(x)$才可能≠0。——所以该方程的解为$g_y(x)=\mathrm{A}\delta(x-y)$，其中的δ既可以是 Dirac δ也可以是 Kronecker δ。——但书上是从 Dirac δ函数的性质——挑选性的角度，认为此解、此δ就是 Dirac δ。

为了使得该本征函数仍然遵循狄拉克正交归一化，$<g_{y'}|g_y>=<g_{y'}(x)|\mathrm{A}\delta(x-y)>=\mathrm{A}g_{y'}(y)=\mathrm{A}^2\delta(y-y')$，约定其中A=1，于是$g_y(x)=\delta(x-y)$、$<g_{y'}|g_y>=\delta(y-y')$。

这些本征函数也是 complete 的：$f(x)=<c_y|g_y(\mathrm{x})>=c(x)$，红色表示对 y 积分；其中系数$c(y)=<g_y(\mathrm{x})|f(x)>=f(y)$。

或者简写为$f=<c(y)|g_y>$、$c(y)=<g_y|f>$。

4.Generalized Statistical interpretation

这里有点意思，总波函数ψ(x)形式保持不变，但ψ_n只被认为是(属于)哈密顿算符$\hat{H}$的本征函数们：总波函数ψ不仅可表示为ψ_n的线性叠加：$\psi=\sum_n c_n\psi_n$，还可表示为任何可观测量 Q，其算符$\hat{Q}$所对应的正交归一的本征函数f_n们的线性叠加：$\psi=\sum_n c_nf_n$。【格里菲斯这里写错了么，$\sum_n c_nf_n(x)$竟然能$=\Psi(\mathrm{x,t})$？c_n里面有参数 t？这里$f_n(x)$怕是$f_n(x,t)$吧】

在这里，作者强调了他非常不喜欢某个人说$|c_n|^2$是 the particle 处于f_n态的几率，而应该表述为，$|c_n|^2$是每次测量(系统的某个可观测量 Q)这个行为 act，导致波函数塌缩到f_n的几率，以及得到本征值q_n的几率。其中$c_n=<f_n|\psi>$。

而对于连续谱，可观测量 Q 的本征值q_n被写作 z(我不喜欢写作q_z)，本征函数f_n写作f_z，得到的本征值处于$z\sim z+\mathrm{d}z$之间的几率是$|c(z)|^2dz$，比如之前的$|\phi(\mathrm{k})|^2dk$、$|c(p)|^2dp$；其中$c(z)=<f_z|\psi>$，这里的本征值 z 可以是之前的 p、y 等，比如$c(p)=<f_p|\psi>$、$c(y)=<g_y|\psi>=\psi(\mathrm{y})$。【其中的 z 只是表示任意复数】

同样可证明$\sum_n|c_n|^2=1$、$\sum_n|c_n|^2q_n=<Q>_\psi=<Q>_\Psi=<Q>$。【可参照$<H>=<H>_\psi=<H>_\Psi$的证明】

5.The Uncertainty Principle

①.The Generalized Uncertainty Principle

(1).之前给出过$\sigma_{Q_i}^2=<(\hat{Q}-<Q>_{\psi_i})^2>_{\psi_i}=<(\hat{Q}-q_i)^2>_{\psi_i}=<\psi_i|(\hat{Q}-q_i)^2\psi_i>=<(\hat{Q}-q_i)\psi_i|(\hat{Q}-q_i)\psi_i>$;

现在直接用它：$\sigma_A^2=<(\hat{A}-<A>)\psi|(\hat{A}-<A>)\psi>$，其中$<A>=<A>_\psi$、$\sigma_A^2=<(\hat{A}-<A>_\psi)^2>_\psi$。设其中$(\hat{A}-<A>)\psi=f$，则$\sigma_A^2=<f|f>$;

同理，$\sigma_B^2=<(\hat{B}-<B>)\psi|(\hat{B}-<B>)\psi>=<g|g>$;

于是根据施瓦兹不等式：$\sigma_A^2\sigma_B^2=<f|f><g|g>\geq|<f|g>|^2$;

对于任意复数 z，有$|z|^2=[Re(z)]^2+[Im(z)]^2\geq[Im(z)]^2=[\frac{1}{2i}(z-z^*)]^2$;

设 z=$<f|g>$，则$|<f|g>|^2\geq[\frac{1}{2i}(<f|g>-<g|f>)]^2$;

其中，$<f|g>=<f|g>_\psi=<(\hat{A}-<A>)\psi|(\hat{B}-<B>)\psi>=<\psi|(\hat{A}-<A>)(\hat{B}-<B>)\psi>=<\psi|(\hat{A}\hat{B}-<A>\hat{B}-\hat{A}<B>+<A><B>)\psi>=<\psi|\hat{A}\hat{B}\psi>-<A><\psi|\hat{B}\psi>-<B><\psi|\hat{A}\psi>+<A><B><\psi|\psi>=<\hat{A}\hat{B}>_\psi-<A><\hat{B}>_\psi-<B><\hat{A}>_\psi+<A><B>=<\hat{A}\hat{B}>-<A><B>-<B><A>+<A><B>=<\hat{A}\hat{B}>-<A><B>$; 【其中第三个等号用到了$(\hat{A}-<A>)$的厄米性】

同样，$<g|f>=<\hat{B}\hat{A}>-<B><A>$;

于是$<f|g>-<g|f>=<\hat{A}\hat{B}>-<\hat{B}\hat{A}>=<\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}>=<[\hat{A},\hat{B}]>$。

代回得，$\sigma_A^2\sigma_B^2=|<f|g>|^2=[\frac{1}{2i}(<f|g>-<g|f>)]^2\geq[\frac{1}{2i}<[\hat{A},\hat{B}]>]^2$。

注意 3 点：a.先对易再平均。何况如果反过来先平均再对易，则平均后是个物理量，而不是两个算符，怎么可能对易呢？b.你可能想把i提出来，使得整个式子变为$-[\frac{1}{2}<[\hat{A},\hat{B}]>]^2$，但其实两个厄米算符对易关系中，有自己的$i$，会与第三个中括号里面的$i$约去(不过数学上可以这么做$-\frac{1}{2}[<[\hat{A},\hat{B}]>]^2$，其中的$[<[\hat{A},\hat{B}]>]^2$中也会出来一个负号)。c.第三个中括号只是个括号，啥物理意义也没有，不像第一个中括号是对易关系。

(2).举个例子，$\sigma_x^2\sigma_p^2\geq[\frac{1}{2i}<[\hat{x},\hat{p}]>]^2=[\frac{1}{2i}<i\hbar>]^2=[\frac{1}{2i}i\hbar]^2=(\frac{\hbar}{2})^2$，即$\sigma_x\sigma_p\geq\frac{\hbar}{2}$。可见这个关系只是个特例。普遍地，对于每一对可观测量，如果其对应两个算符不对

易，则它俩之间总存在一个属于它俩的不确定原理。这样不对易的它俩，称为一对 incompatible observables，它们所具有的性质便是：没有共同的一组本征函数，即使两 set 基矢可能会有交集；compatible=commuting observables 就具有共同的一组本征函数，比如 H 原子中，哈密顿量，角动量的 magnitude，和角动量的 z 分量，三者都共享同一组本征函数。

Note that 不确定原理不是一个额外的假设，而是统计解释的一个自然而然的推论。为什么在实验室无法同时测量 x 和 p？——如果你测得了粒子的 x，那么测量 x 时的 act，就使得粒子的总波函数在该点的窄区间范围内 spike，即分布函数是个面积=1 的δ函数；以至于该δ(x)的傅里叶变换 C(k)=$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\xi)\cdot e^{-ik\xi}\cdot d\xi=\frac{1}{2\pi}e^{-ik0}=\frac{1}{2\pi}$，这就是凑成δ(x)=$\int_{-\infty}^{\infty}C(k)e^{ikx}dk$的傅里叶积分系数 C(k)，也就是一系列波矢、波长、动量不一的子波的集合！而且，C(k)=constant 使得 k-space 中的分布简直各种成分都有且比例平摊。【可以验证一下δ(x)的傅里叶积分=$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi}e^{ikx}dk=\frac{1}{2\pi}\lim_{k\to\infty}\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{ix}=\frac{1}{2\pi}\lim_{k\to\infty}\frac{2i\sin(kx)}{ix}=\lim_{w\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(kx)}{x}=\delta_1(x)$】

而如果你测量动量，则该 act 会使得波矢 k 确定下来，这样其在动量空间中的概率密度函数就是一个δ(k)(你直接用δ(p)也可)，而从常数 A 的傅里叶变换：$\mathcal{F}[A]=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}A\cdot e^{-ik\xi}\cdot d\xi=\frac{A}{2\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{e^{-ik\xi}-e^{ik\xi}}{-ik}=\frac{A}{2\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{-2i\sin(k\xi)}{-ik}=\frac{A}{\pi}\lim_{\xi\to\infty}\frac{\sin(k\xi)}{k}=A\delta_1(k)$，可知$\delta_1(k)$是由一个系数为 A=1 的实空间子波构成的(或者与上文对称地，为了得该波的振幅，你用 A 的傅里叶积分=$\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{F}[A]e^{ikx}dk=\int_{-\infty}^{\infty}A\delta_1(k)e^{ikx}dk=Ae^{ik0}=A$也可以)，该波函数在空间各处的概率密度$|A|^2$归一化后的分布函数也是各处概率均等的；或者直接由于 p 定下来了，则用德布罗意关系，波长也确定下来，在实空间、坐标空间中塌缩为一个单色子波，波怎么确定位置(当然其实这是德布罗意波)?

因此如果先测定位置，后测定动量，则虽前一个 act 使得ψ=$<c(y)|g_y(x)>=<c(p)|f_p(x)>=<c(z)|f_z(x)>$…塌缩为了ψ=$g_y(x)=<c(p)|f_p>=$…，但后一个 act 在使得ψ=$<c(p)|f_p(x)>$塌缩为$\psi_p=f_p(x)$的同时，会使得前一个已经测准了的位置重新回到不确定的状态，即总波函数由相应 x 算符的其中一个本征函数$g_n=g_y$，重新回到 x 算符的所有本征函数叠加而成的叠加态ψ=$\sum_n c_n g_n=<c_y|g_y(x)>$，此时 ψ=$<c(y)|g_y(x)>=f_p(x)=$…哈哈哈！这个解释简直印证了我们的唯象理论！

而且更有甚者，即对于三个可观测量及以上的普遍结论(该结论必须满足，因二元的成立是三元成立的必要条件，它必须包含二元，且没有特殊性地包含二元：不会有选择性/指定地使已经塌缩的其他某个可观测量的小本征函数复原为叠加态，而是使得ψ对其余所有可观测量的塌缩或未塌缩的态全都回到相应的叠加态)：对任何某个可观测量的测量，都会导致ψ回到以其他可观测量的本征函数为基矢的叠加态！比如之前的因测量而塌缩成的$f_z(x)$将回到$<c(z)|f_z(x)>$、之前的f_n回到$\sum_n c_n g_n$，而其余所有已经是其他本征函数的线性叠加的态ψ保持叠加态不变；当然，在进行任何下一次测量操

作时，遗留下来的塌缩的态只可能有一个，因为一次操作只能使得一个可观测量类别下的叠加态塌缩为确定态。

【一个与之有点矛盾的想法：其实你测得的是粒子的群速度所对应的 p，因此你测的对象是一堆单色波的集合，对应的是一个波包，里面有各种 p 的子波，这样你就测不准 p？——之前是测 p 测不准 x，现在是测得的 p 不是真的 p？这个想法得好好琢磨琢磨。】

用形象的话来说，$|1111111111...> \xrightarrow{\text{测量第三种/个可观测量,则 yields}} |1101111111...> \xrightarrow{\text{再次测量第五种/个可观测量,则 yields}} |1111011111...> \xrightarrow{\text{再次测量第六种/个可观测量,则 yields}} |1111101111...>$……，其中不同(位置)的 1 表示ψ以不同的本征函数展开/叠加而成的**叠加态 superposition states**，它们的和都表示 and 等于ψ，地位平等，只是**基矢不同，属于不同的可观测量的算符**；0 表示该可观测量的对应算符的本征函数的叠加$\sum_n c_n f_n$或$<c(z)|f_z(x)>$，塌缩为其中一个确定态f_n或f_z，对应的测量值塌缩为q_n或z，**强调塌缩结果为 determinate states**；红色表示因测量该可观测量，而导致以该可观测量算符的本征函数的叠加而成的总波函数$\sum_n c_n f_n$或$<c(z)|f_z(x)>$，塌缩为了f_n或f_z，强调(有过 1→0 的)塌缩过程；绿色表示上一个被测量的可观测量所对应的塌缩后的f_n或f_z，因测量其他可观测量，而被复原为了$\sum_n c_n f_n$或$<c(z)|f_z(x)>$，强调(有过 0→1 的)复原过程。【这就很量子了：hardness 和 color 就属于这样一对 incompatible observables；你可以 have a check，对比一下之前的唯象理论】

当然，以上结论都建立在这些 1111 们对应的可观测量不仅是两两不同的，而且还得是两两之间 incompatible、noncommuting 的，即必须分别对应不完全相同的两组本征函数(要知道两个不同的可观测量也可能对应同一组本征函数：compatible observables)，因而一个 Q 就是一种 Q。否则如果三个 observables 都拥有同一组本征函数，则$|111> \xrightarrow{\text{测量第一种/个可观测量,则 yields}} |000> \xrightarrow{\text{测量第二种/个可观测量,则 yields}} |000>$，也就是说，由于这三个 observables 因共享一组基矢，而一旦测量到三者中的某个，得到其对应的q_n或z，此时$\sum_n c_n f_n$或$<c(z)|f_z(x)>$也塌缩为了f_n或f_z，则虽然没有测量另外两个，但它们的本征函数业已均因共享$\sum_n c_n f_n$或$<c(z)|f_z(x)>$而也跟着变为了同一个f_n或f_z，它俩所对应的q或z也都分别变为了q'_n或z'、q''_n或z''，虽然你尚未测量它们。但由于本质上态已经塌缩为确定了，对应的态所牵连的所有可观测量的值，也都已经塌缩了。——此时如果你测量剩下两个中的任何一个，则必然是q'_n或z'、q''_n或z''，没有其二，而且无论再怎么反复测量共享同一组本征函数的其他可观测量，相应的本征值绝不改变。【这就很经典了】

除非，此时你再测量其他的与这些 compatible observables 不 compatible 的 observables，否则它们的本征值绝不改变；且一但测其他与它们 incompatible 的

observables，这类 compatible observables 就返回 random again，全都返回叠加态；再加上我们上一段的“一旦测量 compatible observables 中的某个，其他的值和本征函数也因共享而同时全都确定”，我们用这三条额外的 rules，将构造出以下 vision：一个 Q 只是一种/类 Q 之一，但每次测量只能测其中一个：

$$|1_1 1_1 1_2 1_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{测量第 2 个可观测量,则 yields}} |0_1 0_1 1_2 1_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...>$$

$$\xrightarrow{\text{再次测量第 5 个可观测量,则 yields}} |1_1 1_1 1_2 1_3 0_4 0_4 0_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{再次测量第 7 个可观测量,则 yields}}$$

$$|1_1 1_1 1_2 1_3 0_4 0_4 0_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{再次测量第 4 个可观测量,则 yields}} |1_1 1_1 1_2 0_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...>$$

……这里每个 0 比以往有着更多的意义：深刻地联通了一类可观测量——同类可观测量塌缩为同一个确定态，这样同一个确定态所对应的不同的同类可观测量的观测值，与该确定态绑定。

以上/其中的复原机制，想必我们已经说过了：这是由广义不确定性原理$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq [\frac{1}{2i} < [\hat{A},\hat{B}] >]^2$保证的：由于 incompatible observables 不对易，所以$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，所以$[\frac{1}{2i} < [\hat{A},\hat{B}] >]^2 > 0$，所以不共享同一组本征函数的$\hat{A},\hat{B}$两个算符，满足$\sigma_A^2\sigma_B^2 > 0$，因此当$\sigma_A = 0$时，$\sigma_B = \infty$，即当 A 被无比精确地测定的同时，B 的不确定度一定无穷大，或者你用极限的方式来理解它：$\sigma_A \to 0$时，$\sigma_B \to \infty$，而$\sigma_B \to \infty$便意味着算符$\hat{B}$的确定态，被“$\sigma_A \to 0$+不确定性原理”强迫复原为了叠加态。

Problem 3.27 就精彩地 illustrate 了“share 同一组基矢”的延拓：“基矢相互关联(有点像“共享一部分全同的基矢，即有交集”，但本质上不是)”的两个 operator 的测量塌缩现象——可能同一体系的多个可观测量，两两之间的基矢们，互相是对方基矢们的线性叠加，是件很常见的事——纠缠？(只不过这里所说的纠缠是同一个粒子/system 的不同可观测量之间的；而不是两个体系之间的)。这样的话，属于不同算符的小波函数们，将与“share 同一组基矢”一样，因牵连体系中某个可观测量的总波函数塌缩为小波函数，互相决定其值，只不过其他被牵连的可观测值，不再是要么全 0,要么全 1 这样的整齐的二元分布了，而出现何种本征值，对于每个其他未被观测的相关联的算符而言，仍然是彼此相对独立的。

【一个波函数的塌缩导致同类波函数的塌缩，导致全 0(即全塌缩为确定的对应 value；对应 determinate states)是大多不会的，而是其余同类可观测量的波函数仍为 1(即仍然不确定、是叠加态 superposition states)，但 1 中的几率已经确定(不像其他 incompatible 的可观测量的 1，其中的几率仍然未确定：虽然可通过求得c_n来确定，但这里的蓝色表示“牵连地确定”)；因其余波函数的塌缩，而全 1，应该仍成立，毕竟不确定原理摆在那里；不过可能其余 group 的所有 1 都是 1，毕竟基矢都 live in

Hilbert 空间，都可互相线表？不过也可能因跨组之间线表矩阵不确定而只有 group 内的各可观测量的小波函数可以互相线表：

$|1_1 1_1 1_2 1_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{测量第 2 个可观测量,则 yields}} |1_1 0_1 1_2 1_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...>$ $\xrightarrow{\text{再次测量第 5 个可观测量,则 yields}} |1_1 1_1 1_2 1_3 0_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{再次测量第 7 个可观测量,则 yields}}$ $|1_1 1_1 1_2 1_3 1_4 1_4 0_4 1_5 1_5 ...> \xrightarrow{\text{再次测量第 4 个可观测量,则 yields}} |1_1 1_1 1_2 0_3 1_4 1_4 1_4 1_5 1_5 ...>$……】

$\hat{A}, \hat{B}$都分别有各自的两个归一化了的 eigenstates$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}$、$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}$，但两两之间以如下方式相互关联(完全关联，而非部分关联；且是双向关联，而不是单向)：$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&4\\4&-3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}$。可求逆矩阵反解得$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=5\begin{pmatrix}3&4\\4&-3\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=5\cdot-\frac{1}{25}\begin{pmatrix}-3&4\\4&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}$ $=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&-4\\4&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}$。

他们的归一化将如下体现：

(a).Observable A is measured, and the value a_1 is obtained.则执行了该次测量后极短时间内，系统所处的态是？——当然是对应的本征函数/本征态ψ_1了。

(b).If B is now measured. What are the possible results, and what are their probabilities? ——这里 now 是紧接着上一个(a).问问的，因此系统仍然处于ψ_1态，即仍然有$|\psi_1|^2=1$，即$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，于是$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&-4\\4&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix}$，于是系统塌缩为$\phi_1$态的概率为$|\phi_1|^2=\left(\frac{3}{5}\right)^2=\frac{9}{25}$、塌缩为$\phi_2$态的概率为$|\phi_2|^2=\left(\frac{4}{5}\right)^2=\frac{16}{25}$。

(c).独立于(b).，(a).的延续：Right after the measurement of B, A is measured again. What is the probability of getting a_1?

这题怪就怪在没给你 B 的测量结果是b_1还是b_2，即对应的$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$还是$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，但该题是接着(a).说的，因此如果先以$\frac{9}{25}$的概率得到的$b_1$，对应的$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，则在再测量 A 之前，$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&4\\4&-3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix}$，此时测量 A 导致波函数坍缩至$\psi_1$的概率为$|\psi_1|^2=\left(\frac{3}{5}\right)^2=\frac{9}{25}$，因此通过$a_1\to b_1\to a_1$两个步骤，(再次)得到$a_1$的概率为$=\frac{9}{25}\times\frac{9}{25}$；

而如果先以$\frac{16}{25}$的概率得到的b_2，对应的$\begin{pmatrix}\phi_1\\\phi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，因此在再次测量 A 之前，$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&4\\4&-3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}4\\-3\end{pmatrix}$，于是此时测量 A 导致波函数坍缩至$\psi_1$的概率为$|\psi_1|^2=\left(\frac{4}{5}\right)^2=\frac{16}{25}$，因此通过$a_1\to b_2\to a_1$两个步骤，(再次)得到$a_1$的概率为$=\frac{16}{25}\times\frac{16}{25}$。

总的a_1→a_1的结果为$\left(\frac{9}{25}\right)^2+\left(\frac{16}{25}\right)^2$；而如果告诉了测量 B 的结果，则将简单地是$b_1$→$a_1$或$b_2$→$a_1$，这就和第二问$a_1$→$b_1$或$a_1$→$b_2$没有区别了；而如果测了 A，不去测 B，再直接测 A，那仍然将是得到a_1。

---

(3).再给出一些对易关系的其他线性运算法则/规律：$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$、$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$；Jacobian: $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0$。

其他例子：a.$[\hat{x},\hat{p}^2]=\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}=2i\hbar\hat{p}$，于是$[\hat{x},\hat{H}]=[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}]=\frac{1}{2m}[\hat{x},\hat{p}^2]+[\hat{x},\hat{V}]=\frac{2i\hbar\hat{p}}{2m}+0=\frac{i\hbar\hat{p}}{m}$。于是$\sigma_x^2\sigma_H^2\geq[\frac{1}{2i}<[\hat{x},\hat{H}]>]^2=[\frac{1}{2i}<\frac{i\hbar\hat{p}}{m}>]^2=\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2[<\hat{p}>]^2$，于是$\sigma_x\sigma_H\geq\frac{\hbar}{2m}|<\hat{p}>|$，这里应该是绝对值(因为$\sigma_x\sigma_H=\sigma_H\sigma_x$，但里面的对易算符反号)，而不是模，对指数上有 i 的 e 指数波函数求偏 x，会使得$\hat{p}$中的i与之约掉。

b.$[\hat{x}^n,\hat{p}]=[\hat{x}^{n-1}\hat{x},\hat{p}]=\hat{x}^{n-1}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x}^{n-1},\hat{p}]\hat{x}=i\hbar\hat{x}^{n-1}+x(\hat{x}^{n-2}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x}^{n-2},\hat{p}]\hat{x})=2i\hbar\hat{x}^{n-1}+\hat{x}^2[\hat{x}^{n-2},\hat{p}]=ni\hbar\hat{x}^{n-1}$。

c.更普遍地，$[f(x),\hat{p}]g=f\hat{p}g-\hat{p}(fg)=f\hat{p}g-f\hat{p}g-g\hat{p}f=-g\hat{p}f$，得到$[f(x),\hat{p}]=-\hat{p}f=i\hbar\frac{df}{dx}$。比如 b.就可这么得出；d.中会用到$[V(x),\hat{p}]=i\hbar\frac{dV}{dx}$。

d.$[\hat{H},\hat{p}]=[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V},\hat{p}]=[\hat{V},\hat{p}]=i\hbar\frac{dV}{dx}$。

e.对于三维矢量$\boldsymbol{r}$和$\boldsymbol{p}$，有$[r_i,r_j]=[p_i,p_j]=0$、$[r_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$。【$[p_i,p_j]$中用到了坐标的二阶混偏相等；$[r_i,p_j]$中用到了对$r_j$的偏导对$r_i$不起作用】于是$\sigma_{r_i}\sigma_{p_i}\geq|\frac{1}{2i}<[r_i,p_j]>|=|\frac{1}{2i}<i\hbar\delta_{ij}>|=\frac{\hbar}{2}\delta_{ij}$，可见 there's no restriction on, say, $\sigma_y\sigma_{p_z}$。

②.The Energy-time Uncertainty Principle

(1).$\frac{d}{dt}<Q>=\frac{d}{dt}<\psi|\hat{Q}\psi>=<\frac{\partial\psi}{\partial t}|\hat{Q}\psi>+<\psi|\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\psi>+<\psi|\hat{Q}\frac{\partial\psi}{\partial t}>$，因$\hat{H}\psi=\hat{E}\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$，所以$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi$，代入得$\frac{d}{dt}<Q>=\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^*<\hat{H}\psi|\hat{Q}\psi>+<\psi|\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\psi>-\frac{i}{\hbar}<\psi|\hat{Q}\hat{H}\psi>=<\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}>+\frac{i}{\hbar}(<\hat{H}\psi|\hat{Q}\psi>-<\psi|\hat{Q}\hat{H}\psi>)$，而因$\hat{H}$的厄米性，有$<\hat{H}\psi|\hat{Q}\psi>=<\psi|\hat{H}\hat{Q}\psi>$，于是$\frac{d}{dt}<Q>=<\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}>+\frac{i}{\hbar}(<\psi|\hat{H}\hat{Q}\psi>-<\psi|\hat{Q}\hat{H}\psi>)=<\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}>+\frac{i}{\hbar}<[\hat{H},\hat{Q}]>$。即$\boxed{\frac{d<Q>}{dt}=\frac{i}{\hbar}<[\hat{H},\hat{Q}]>+<\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}>}$。【该公式将算符之一的 H 和其他所有算符的全集 Q 联系在一起了，你说棒不棒】

一般力学量不显含时间，因此$\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}=0$(按理说不显含是指$\frac{dQ}{dt}=0$，而$\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}$可能不等于 0？)，所以只剩下$\boxed{\frac{d<Q>}{dt}=\frac{i}{\hbar}<[\hat{H},\hat{Q}]>}$。因此若 $\hat{Q}$ commutes with $\hat{H}$，即若$\hat{Q}$与$\hat{H}$共享一组本征函数，则$<Q>$是个常数。

利用$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq [\frac{1}{2i} < [\hat{A},\hat{B}] >]^2$，如果$Q$不显含时间，则将有$\sigma_H^2\sigma_Q^2 \geq [\frac{1}{2i} < [\hat{H},\hat{Q}] >]^2$ $=[\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}<Q>}{\mathrm{dt}}]^2=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2[\frac{\mathrm{d}<Q>}{\mathrm{dt}}]^2$，于是$\sigma_H\sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2}|\frac{\mathrm{d}<Q>}{\mathrm{dt}}|$，定义能级宽度△E:= σ_H、粒子在能级上停留的时间△t:= $\sigma_Q/|\frac{\mathrm{d}<Q>}{\mathrm{dt}}|$(至少量纲上是没问题的，其物理意义需察看$\sigma_Q=|\frac{\mathrm{d}<Q>}{\mathrm{dt}}|\cdot$△t，格里菲斯说的很清楚)，得到△E·△t$\geq\frac{\hbar}{2}$。

(2).现在我们终于能处理一些以前未能说明的小细节了：

a.利用之前①.(3).a.中得到的$[\hat{x},\hat{H}]=\frac{i\hbar\hat{p}}{m}$，$\frac{\mathrm{d}<x>}{\mathrm{dt}}=\frac{i}{\hbar} < [\hat{H},\hat{x}] >=\frac{i}{\hbar} < -\frac{i\hbar\hat{p}}{m} >=\frac{<\hat{p}>}{m}$。它其实是一维分量形式：$\frac{\mathrm{d}<x>}{\mathrm{dt}}=\frac{<\hat{p}_x>}{m}$，其三维形式为$\frac{\mathrm{d}<r>}{\mathrm{dt}}=\frac{\mathrm{d}<x>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{i}+\frac{\mathrm{d}<y>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{j}+\frac{\mathrm{d}<z>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{k}$ $=\frac{<\hat{p}_x>}{m}\boldsymbol{i}+\frac{<\hat{p}_y>}{m}\boldsymbol{j}+\frac{<\hat{p}_z>}{m}\boldsymbol{k}=\frac{<\hat{p}>}{m}$.

b.利用之前①.(3)d.中得到的$[\hat{H},\hat{p}]=i\hbar\frac{dV}{dx}$，$\frac{\mathrm{d}<p>}{\mathrm{dt}}=\frac{i}{\hbar} < [\hat{H},\hat{p}] >=\frac{i}{\hbar} < i\hbar\frac{dV}{dx} >=-<\frac{dV}{dx}>$，它也是一维分量形式：$\frac{\mathrm{d}<\hat{p}_x>}{\mathrm{dt}}=-<\frac{\partial V}{\partial \mathrm{x}}>$，其三维形式为$\frac{\mathrm{d}<\boldsymbol{p}>}{\mathrm{dt}}=\frac{\mathrm{d}<\hat{p}_x>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{i}+\frac{\mathrm{d}<\hat{p}_y>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{j}+\frac{\mathrm{d}<\hat{p}_z>}{\mathrm{dt}}\boldsymbol{k}=-<\frac{\partial V}{\partial \mathrm{x}}>\boldsymbol{i}-<\frac{\partial V}{\partial \mathrm{y}}>\boldsymbol{j}-<\frac{\partial V}{\partial \mathrm{z}}>\boldsymbol{k}=-<\nabla V>$.

6.Dirac Notation

①.$\boldsymbol{b_m}$=$\sum_n \boldsymbol{a_n} < \boldsymbol{e_m}|\hat{\boldsymbol{Q}}\boldsymbol{e_n} >$=$\sum_n \boldsymbol{a_n}\boldsymbol{Q_{mn}}$

既然 4.中提到了$\psi=\sum_n c_n f_n=\sum_n c_n g_n$，现在我们将其写作$|\psi>=\sum_n c_n|f_n >=\sum_n c_n|g_n >$。就需研究表达同一个矢量$|\psi>$，的各个基矢$|f_n >$、$|g_n >$之间的转换关系。

先看看对于不同的两个矢量，被同一组正交归一的基矢表达：$|\alpha>=\sum_n a_n|e_n >$、$|\beta>=\sum_n b_n|e_n >$，其中$a_n=<e_n|\alpha>$、$b_n=<e_n|\beta>$。那么设将$|\alpha>$转换为$|\beta>$的算符/矩阵为$\hat{Q}$，即$|\beta>=\hat{Q}|\alpha>$，来看看系数之间的转换关系，或者说矩阵$\hat{Q}$及其中各元素(需要是什么形式，才能使得 transform 顺利)怎么算：代入分量形式，$\sum_n b_n|e_n >=\sum_n a_n\hat{Q}|e_n >$，左乘一个 bra$<e_m|$，得到$b_m=\sum_n b_n < e_m|e_n >=\sum_n a_n < e_m|\hat{Q}|e_n >$，其中$< e_m|\hat{Q}|e_n >=< e_m|\hat{Q}e_n >=Q_{mn}$就是 Q 矩阵的第(m,n)号元素，于是即得到$b_m=\sum_n a_n Q_{mn}$。

比如$|\alpha>=a_1|e_1 >+a_2|e_2 >$、$|\beta>=b_1|e_1 >+b_2|e_2 >$，其中$a_1^2+a_2^2=b_1^2+b_2^2$、且$|e_1 >$、$|e_2 >$分别为直角坐标系的两个分量 **i**,**j**，正交归一。很容易看出$|\beta>=\hat{Q}|\alpha>$中的$\hat{Q}$矩阵/算符，是个二维的旋转操作。下面我们来证明它：根据$b_m=\sum_n Q_{mn}a_n$，有$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} < e_1|\hat{Q}e_1 > & < e_1|\hat{Q}e_2 > \\ < e_2|\hat{Q}e_1 > & < e_2|\hat{Q}e_2 > \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$。其中$< e_1|\hat{Q}e_2 >$表示先将$\hat{Q}$作用于右矢$|e_2 >$，然后用左矢$< e_1|$去点乘所得结果$|\hat{Q}e_2 >$，实际上就是 **i** 与$\hat{Q}$**j** 的夹角，用眼睛就能看出来这家伙$=-\sin\theta$。

②.投影算符 the projection operator $\hat{P}$(与动量算符不同，是大写的 P)

The license to treat bras as separate entities in their own right, allows for some powerful and pretty notation.

(1).For example, if |α> is a normalized vector 单位矢量, the **projection operator** $\hat{P}:=|\alpha><\alpha|$ picks out the portion 分量 of any other vector that "lies along" |α>:

$\hat{P}|\beta>=|\alpha><\alpha|\beta>=<\alpha|\beta>|\alpha>$。而如果$\{|e_n>\}$ is a discrete orthonormal basis，则将算符$\sum_m\hat{P}_m$=$\sum_m|e_m><e_m|$作用于$|e_m>$，会得到有趣的结论：$\sum_m\hat{P}_m|e_n>$=$\sum_m|e_m><e_m|e_n>$=$\sum_m|e_m>\delta_{mn}$=$|e_n>$，对比可得$\sum_m\hat{P}_m$=1。如果你不信，还可以将其作用于任意一个同一维度的矢量$|\beta>$，于是$\sum_m\hat{P}_m|\beta>$=$\sum_m|e_m><e_m|\beta>$=$\sum_m<e_m|\beta>|e_m>$=$\sum_m c_m|e_m>$=$|\beta>$，该操作相当于将$|\beta>$分解为同维下一个正交基群表示，然后又将分矢量求和为总矢量，等于啥也没干。

Similarly, if $\{e_z\}$ is a Dirac orthonormalized continuous basis，有$<e_z|e_{z'}>=\delta(z-z')$，且$\int\hat{P}_z dz$=$\int|e_z><e_z|dz$=1。

(2).Projection operators are **idempotent** 幂等的：$\hat{P}^2$=$\hat{P}$.

$\hat{P}^2|\beta>$=$\hat{P}(\hat{P}|\beta>)$=$\hat{P}(<\alpha|\beta>|\alpha>)$=$<\alpha|\beta>(\hat{P}|\alpha>)$=$<\alpha|\beta>(|\alpha><\alpha|\alpha>)$=$<\alpha|\beta>|\alpha>$=$|\alpha><\alpha|\beta>$=$\hat{P}|\beta>$. 对于任意$|\beta>$均成立，因此$\hat{P}^2$=$\hat{P}$.

而且它的**本征值为 0,1**：$\hat{P}^2|\psi>$=$\hat{P}(\hat{P}|\psi>)$=$\hat{P}(\lambda|\psi>)$=$\lambda(\hat{P}|\psi>)$=$\lambda(\lambda|\psi>)$=$\lambda^2|\psi>$，又因$\hat{P}^2|\psi>$=$\hat{P}|\psi>$=$\lambda|\psi>$，而$|\psi>$不为 0，所以λ^2=λ，得到λ=0,1。

(3).Let $\hat{Q}$ be an operator with a complete set of orthonormal eigenvectors: $\hat{Q}|e_n>=q_n|e_n>$, show that $\hat{Q}$ can be written in terms of its **spectral decomposition** 谱分解:

谱分解很好理解，就是将$\hat{Q}$与其离散/连续谱值q_n,z给 link 上，以期用其本征值来表达/拼凑出该算符：$\hat{Q}$=$\sum_n q_n|e_n><e_n|$，是个对角阵？可能实践中用的很多：

同样引入试探函数$|\alpha>$=$\sum_n a_n|e_n>$，得到$\hat{Q}|\alpha>$=$\hat{Q}\sum_n a_n|e_n>$=$\sum_n a_n\hat{Q}|e_n>$=$\sum_n<e_n|\alpha>q_n|e_n>$=$\sum_n q_n|e_n><e_n|\alpha>$，于是$\hat{Q}$=$\sum_n q_n|e_n><e_n|$。这反过来说明之前的$\sum_m\hat{P}_m$就是个各$q_m$=1 的矩阵，即单位阵。