2.2 对于一维自由运动粒子,设 $\psi(x,0) = \delta(x) |x| |\psi(x,t)|^2$ 。

傅立叶变换

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{p=-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp$$

但按题意,此式等于 $\delta(x)$ 。但我们知道一维 δ 函数一种表示是:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

将二式比较: 知道
$$_{k=\frac{p}{\hbar}}$$
, $\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp$

并且求得动量空间初始波函数: $\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, 于是, 通过动

量空间 t 时刻波函数得:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{p=-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)} dp$$

利用积分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha \xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{it}}$$

写出共轭函数 (前一式 i 变号):

$$\psi^*(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{imx^2}{2\hbar t}} \sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{-it}}$$

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^2} \times \frac{2m\hbar\pi}{t} = \frac{m}{2\pi\hbar t}$$

2.7 考虑单粒子的薛定谔方程式:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{x},t) + [V_1(\vec{x}) + iV_2(\vec{x})]\Psi(\vec{x},t)$$

 V_1 , V_2 为实函数,证明粒子的几率不守恒。求出在空间体积 Ω 内,粒子几率"丧失"或"增加"的速率。

解:要证明几率不守恒,可以计算总几率的时间变化率, 先考察空间一定体积 Ω 中粒子出现的总几率,总几率是

$$P = \iiint_{\Omega} \Psi^* \Psi d^3 x$$

求总几率的时间变化率

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega} \Psi^* \Psi d^3 x = \iiint_{\Omega} (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi) d^3 x \tag{1}$$

再根据薛定谔方程式和其共轭方程式求出 $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$,有

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{\hbar i} [V_1 + iV_2] \Psi \\ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{\hbar i} [V_1 - iV_2] \Psi^* \end{cases}$$
(2)

将(2)代入(1),化简后得

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \iiint_{\Omega} \left\{ -\frac{\hbar}{2mi} (\boldsymbol{\Psi}^* \nabla^2 \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\Psi} \nabla^2 \boldsymbol{\Psi}^*) + \frac{2V_2}{\hbar} \boldsymbol{\Psi}^* \boldsymbol{\Psi} \right\} d^3 x$$

利用高斯定理将右方第一项变形:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \iiint_{\Omega} \{ -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\boldsymbol{\Psi}^* \nabla \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\Psi} \nabla \boldsymbol{\Psi}^*) \} d^3 x + \frac{2}{\hbar} \iiint_{\Omega} \boldsymbol{\Psi}^* V_2 \boldsymbol{\Psi} d^3 x$$

$$= - \iiint_{\Omega} \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot d\vec{S} + \frac{2}{\hbar} \iiint_{\Omega} \Psi^* V_2 \Psi d^3 x$$
 (3)

令:

$$\vec{J} \equiv \frac{\hbar}{2m i} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

(3) 式改写为:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\iint_{S} \vec{J} \cdot d\vec{s} + \frac{2}{\hbar} \iiint_{O} \psi^* V_2(\vec{x}) \psi d^3 x \tag{5}$$

 $\frac{\partial P}{\partial t}$ 是空间 Ω 内粒子几率减少或增加的速度,右方 $-\iint_{s} \bar{J} \cdot d\bar{s}$ 是指 Ω 的包围面 **S** 上几率流动的速度(流进或流出),右方 $\frac{2}{\hbar}\iiint_{\Omega} \psi^{*}V_{2}(\bar{x})\psi d^{3}x$ 指由虚数势能引起的,附加的几率变化速率,题目所指的是这一项。

2.7 证明从单粒子的薛定谔方程式得出的速度场是非旋的,即

$$\nabla \times \vec{v} = 0, (\vec{v} = \vec{j} / \rho) \qquad \rho = \Psi^* \Psi$$

(证明)根据它的解 $\Psi(\bar{x}, t)$ 和它的共轭波函数 $\Psi^*(\bar{x}, t)$ 可写出几率密度 ρ 和几率流密度 \bar{J} :

$$\rho = \Psi^* \Psi$$

$$\bar{J} = \frac{\hbar i}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$
 速度算符 $\bar{v} = \frac{\hbar i}{2m} \frac{(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)}{\Psi^* \Psi} = \frac{\hbar i}{2m} \left(\frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)$

分量形式:

$$=\frac{\hbar i}{2m}\left\{\left(\frac{1}{\Psi^*}\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}-\frac{1}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\vec{i}\right.\\ \left.+\left(\frac{1}{\Psi^*}\frac{\partial \Psi^*}{\partial y}-\frac{1}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\right)\vec{j}\right.\\ \left.+\left(\frac{1}{\Psi^*}\frac{\partial \Psi^*}{\partial z}-\frac{1}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)\vec{k}\right.\right\}$$

$$= \frac{\hbar i}{2m} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \vec{k} \right\} = \frac{\hbar i}{2m} \nabla \ln \left(\frac{\Psi^*}{\Psi} \right)$$

因而证明 \mathbf{v} 是一个标量场 $\Psi^*(\bar{x})/\Psi(\bar{x})$ 的对数的梯度。梯度是非旋的。

证明: 动能平均值一定为正:

以一维为例,

$$\overline{T} = \iiint \psi^*(p_x) (\frac{p_x^2}{2m}) \psi(p_x) dp_x$$

很容易推广到三维。