

第一周作业参考答案

1. 假设 Ψ_1 和 Ψ_2 是薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi$ 的两个解, 证明 $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ 也是这个方程的解, 其中 c_1, c_2 是任意常数。

证 Ψ_1 和 Ψ_2 分别满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_1 + V(\mathbf{r})\Psi_1, \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_2 + V(\mathbf{r})\Psi_2, \quad (2)$$

对任意常数 c_1, c_2 有

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)}{\partial t} &= i\hbar c_1 \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 + i\hbar c_2 \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 \\ &= c_1 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_1 + V(\mathbf{r})\Psi_1 \right] + c_2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_2 + V(\mathbf{r})\Psi_2 \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) + V(\mathbf{r})(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2), \end{aligned} \quad (3)$$

即 $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ 也是此薛定谔方程的解。

2. 设 $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 和 $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ 是薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi$ 的两个解, 证明 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关。

证 ψ_1 和 ψ_2 分别满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1 + V(\mathbf{r})\psi_1, \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2 + V(\mathbf{r})\psi_2, \quad (2)$$

以 ψ_1^* 左乘式(2), ψ_2 左乘式(1)的共轭, 再相减即得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_1^* \psi_2) &= \frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2 \nabla^2 \psi_1^* - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2), \end{aligned} \quad (3)$$

再对全空间积分, 得到

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) d^3x \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \oint (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) \cdot d\mathbf{s}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $d\mathbf{s}$ 为面元, 按照波函数在无穷远处迅速趋于零的条件, 式(4)右端之面积分为零, 故得

$$\frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x = 0, \quad (5)$$

即 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关。

3. 证明在定态中，概率流密度与时间无关。

证 定态波函数其共轭可表示为

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (1)$$

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r})e^{i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (2)$$

概率流密度为

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*), \quad (3)$$

即定态的概率流密度与时间无关。

或根据定态波函数满足

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi, \quad (4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi = E\Psi, \quad (5)$$

根据概率流密度的定义

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} &= \frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\nabla\Psi + \Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\nabla\Psi - \frac{\partial\Psi}{\partial t}\nabla\Psi^* - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\nabla\Psi^*\right) \\ &= \frac{1}{2m}(E\Psi^*\nabla\Psi - E\Psi^*\nabla\Psi + E\Psi\nabla\Psi^* - E\Psi\nabla\Psi^*) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

即定态的概率流密度与时间无关。

4. 由下列两定态波函数计算概率流密度：

$$(1) \psi_1 = \frac{1}{r}e^{ikr}, \quad (2) \psi_2 = \frac{1}{r}e^{-ikr}.$$

从所得结果说明 ψ_1 表示向外传播的球面波， ψ_2 表示向内（即向原点）传播的球面波。

(1)式概率流密度为

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\frac{1}{r}e^{-ikr}\nabla\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right) - \frac{1}{r}e^{ikr}\nabla\left(\frac{1}{r}e^{-ikr}\right)\right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\frac{1}{r^2}(e^{-ikr}\nabla e^{ikr} - e^{ikr}\nabla e^{-ikr}) \\ &= \frac{\hbar k}{m}\frac{\nabla r}{r^2} = \frac{\hbar k}{m}\frac{\mathbf{r}}{r^3}. \end{aligned}$$

(2)式概率流密度为

$$\begin{aligned}
J &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \left[\frac{1}{r} e^{ikr} \nabla \left(\frac{1}{r} e^{-ikr} \right) - \frac{1}{r} e^{-ikr} \nabla \left(\frac{1}{r} e^{ikr} \right) \right] \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \frac{1}{r^2} (e^{ikr} \nabla e^{-ikr} - e^{-ikr} \nabla e^{ikr}) \\
&= -\frac{\hbar k}{m} \frac{\nabla r}{r^2} = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\mathbf{r}}{r^3}.
\end{aligned}$$

所得结果说明 ψ_1 表示向外传播的球面波，概率流密度垂直球面向外， ψ_2 表示向内（即向原点）传播的球面波，概率流密度垂直球面向内。