量 子 力 学 题 解

（内部资料，只供教师参考，不准翻印）

北大物理系量子力学教学小组编

上 饶 师 专 物 理 科 印 发

一 九 八 三 年 十 月

前　言

今年三月份中国物理学会在北京举办了一次量子力学讲习班，与会教师一致要求翻印北京大学物理系量子力学教学组编写的曾谨言教授编著的《量子力学》习题解答，以满足教学上的需要，经协商由我校承担此项工作。根据原编者意见，此题解仅作教师教学时参考，请不要流传到学生中去。未经原编者同意，也不准翻印。

上饶师专物理科

一九八三年十月

目 录

Ⅰ—Ⅱ　量子论、波函数与波动方程

1、试用量子化条件，求谐振子的能量。

［解一］：设谐振子能量为E，

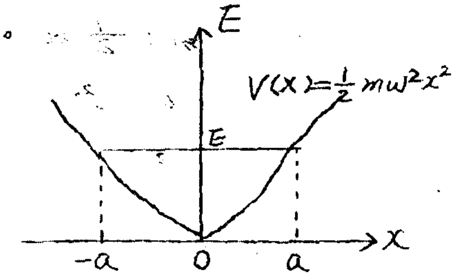


图 1—1

按经典力学

$$E=p^2/2m+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{---(1)}$$

m为振子质量，p为动量，$K=m\omega^2$是为常数、在此谐振子势中运动的经典粒子的角频率为ω，设粒子能量为E，则其活动范围是：

$$|x|\leqslant a \quad \text{------------(2)}$$

其中：$a=\sqrt{2E/m\omega^2}$ ------(3)　$x=\pm a$即转折点。按(1)式得：

$$\oint p\,dx=2\int_{-a}^{+a}\sqrt{2m(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)}\,dx \quad \text{-----(4)}$$

利用(3)式，

$$=2m\omega\int_{-a}^{+a}\sqrt{a^2-x^2}\,dx$$

积分得：

$$=2m\omega\cdot\frac{\pi}{2}a^2$$

按量子化条件

$$=nh \qquad \therefore a^2=nh/\pi m\omega \quad \text{---(5)}$$

代入(3)式：

$$E=\frac{1}{2}m\omega^2a^2=nh\omega/2\pi=n\hbar\omega \quad (n=1,2,3\cdots) \quad \text{---(6)}$$

［解二］：按经典力学，在谐振子势$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2$中运动的粒子，将作简谐运动，角频率为$\sqrt{K/m}$，m为振子质量。因此，若取$K=m\omega^2$，则振子角频率即为ω（周期$T=2\pi/\omega$）。选择适当相角（或时间零点），谐振子的位置可以表为

$$x=a\sin\omega t \qquad (a\text{为振幅}) \quad \text{------(7)}$$

因此　　$p=m\dot{x}=ma\omega\cos\omega t$

代入量子化条件，积分一周期

$$\oint p\,dx=\int_0^{2\pi/\omega}ma\omega\cos\omega t\cdot a\omega\cos\omega t\,dt$$

$$=ma^2\omega^2\int_0^{2\pi/\omega}\cos^2\omega t\,dt \quad \text{积分后得}$$

$$=\pi m\omega a^2=nh \quad \text{-----------(8)}$$

用(7)式代入能量公式(1)，化简得

$$E = p^2/2m + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$= \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 \quad \text{利用(8)式得}$$

$$= \frac{1}{2} m\omega^2 \cdot nh/\pi m\omega = n\hbar\omega \quad (n=1,2,3\cdots)\cdots\cdots(9)$$

2、用量子化条件求限制在箱内运动的粒子的能量。箱的长宽高分别为 a、b 和 c。

〔解〕：除碰壁时以外，粒子在箱内作自由运动，动量是守恒的。在碰壁（弹性碰撞）时，粒子动量反向，但数值不变。选箱的长宽高三个方向为 x、y、z 轴方向。把粒子沿 x、y、z 轴三个方向的运动分开处理。利用量子化条件

$$\oint p_x dx = n_x h$$

$$\oint p_y dy = n_y h$$

$$\oint p_z dz = n_z h \qquad n_x、n_y、n_z = 1,2,3\cdots\cdots$$

但

$$\oint p_x dx = p_x 2a$$

$$\oint p_y dy = p_y 2b$$

$$\oint p_z dz = p_z 2c$$

$\therefore$ $p_x = n_x h/2a$，$p_y = n_y h/2b$，$p_z = n_z h/2c$。而粒子总能量为：$E = \frac{(p_x^2+p_y^2+p_z^2)}{2m} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right]$

其中：n_x、n_y、$n_z = 1,2,3\cdots\cdots$

3、平面转子的转动惯量为 I，求它的能量允许值。

〔解〕：平面转子的转角记为 θ

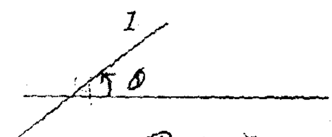


图 1—2

它的角动量记为 $p_\theta = I\dot{\theta}$，p_θ 是运动常数，θ 看成广义坐标，p_θ 为相应的广义动量。按照量子化条件

$$\int_0^{2\pi} p_\theta d\theta = nh \qquad n = 1,2,3\cdots\cdots$$

$$2\pi P_\theta = mh$$

$$P_\theta = m\hbar$$

因而转子的能量为:

$$E = P_\theta^2/2I = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

4. 有一个带电 q 的粒子在平面内运动,垂直于平面方向有磁场 B。求粒子能量允许值。

[解]: 设粒子速度为 v,它受到 Lorentz 力作用而不断改变方向,构成圆周运动。设轨道半径为 r,则(用高斯单位制)

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{B|q|v}{c} \quad \text{------} (1)$$

$$\therefore \quad r = \frac{mc}{|q|B} v$$

$$\text{或} \quad v = \frac{|q|B}{mc} r \quad \text{---------} (2)$$

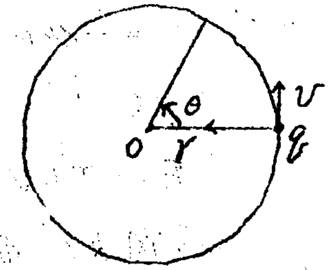


图 1—3

c 为光速,m 为粒子质量。因此,粒子的角动量(广义动量)为 mvr,是守恒量。代入量子化条件

$$\oint P_\theta d\theta = 2\pi mvr = nh, \quad n = 1, 2, 3 \text{-----}$$

$$mvr = n\hbar \quad \text{---------} (3)$$

用(2)式代入: $$= m\frac{|q|B}{mc} r^2$$

$$r^2 = \frac{n\hbar c}{|q|B} \quad \text{------} (4)$$

即 r 取值是量子化的,$r = r_n = \sqrt{n\hbar c/|q|B}$, $n = 1, 2, 3 \text{---}$ (4)

现在来研究粒子的能量。先讨论粒子的动能

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\frac{q^2B^2}{m^2c^2}r^2$$

$$= \frac{1}{2}m\frac{q^2B^2}{m^2c^2} \cdot \frac{n\hbar c}{|q|B}$$

$$= \frac{|q|B}{2mc} n\hbar \quad \text{---------------} (5)$$

其次讨论势能。带电粒子作圆周运动，相当于有一个磁矩 μ，取磁场方向 $\vec{B}$ 为正方向，则磁矩：

$$\mu=\frac{iA}{c}=-g\frac{v}{2\pi r}\cdot\frac{\pi r^2}{c}=-\frac{gvr}{2c}\cdots(6)$$

$v/2\pi r$ 代表粒子作圆周运动的频率，i 是电流强度。$A=\pi r^2$ 是电流环的面积。用(2)、(4)式代入(6)式：

$$\mu=-\frac{g}{2c}\frac{|g|B}{mc}r^2=-\frac{g}{2c}\frac{|g|B}{mc}\cdot\frac{n\hbar c}{|g|B}=-n\frac{\hbar g}{2mc}$$

因此，与磁场 B 的作用能为

$$V=-\mu B=n\hbar\frac{|g|B}{2mc}$$

所以，带电粒子总能量为：

$$E=T+V=n\hbar|g|B/mc\qquad n=1,2,3,\cdots$$

（参阅§6 第2题，用量子力学严格求解的结果：

$$E_n=\frac{\hbar|g|B}{2\mu c}(2n+1)$$
$$=\frac{\hbar|g|B}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

其中：$n=0,1,2,3,\cdots\cdots$）

5. 对于高速运动粒子（静质量为 m），能量及动量由下式给出：$E=mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}$，（v 是粒子速度）

$\vec{p}=m\vec{v}/\sqrt{1-v^2/c^2}$。

试根据哈密顿量 $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$ 来验证这两式，由此求出粒子速度与德·布罗意波的群速的关系。计算波的相速，并证明相速大于光速。

〔解〕：利用 $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$，代入正则方程

$$\dot{x}=\frac{\partial H}{\partial p_x}=\frac{c^2p_x}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}}=v_x\text{--------}(1)$$

类似可求 $\dot{y}$、$\dot{z}$，从而求出 $\vec{v}=\frac{c^2\vec{p}}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}}$ ------(2)

平方 $$c^4p^2=(m^2c^4+p^2c^2)v^2$$

消去c^2 $$p^2(c^2-v^2)=m^2c^2v^2$$

$$p=\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\ \text{---} \qquad (3)$$

又根据(2)式，$\vec{p}$与$\vec{v}$同向

$$\vec{p}=\frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\ \text{---} \qquad (4)$$

此外，$E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}=mc^2\left(1+\frac{p^2}{m^2c^2}\right)^{\frac{1}{2}}$

利用(3)式，$E=mc^2\left(1+\frac{v^2/c^2}{1-v^2/c^2}\right)^{1/2}=mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}$ (5)

按照德·布罗意假定，$E=\hbar\omega$，$p=\hbar k$，可得

$$\hbar\omega=\sqrt{m^2c^4+\hbar^2c^2k^2}$$

∴ 群速度为

$$v_g=\frac{d\omega}{dk}=\frac{c^2\hbar k}{\sqrt{m^2c^4+\hbar^2c^2k^2}}$$

$$=\frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}}=v \quad \text{(利用(6)式)} \qquad (7)$$

即波包群速v_g等于粒子速度v。

德·布罗意波的相速为

$$u=\frac{\omega}{k}=\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2k^2}+c^2}>c \qquad (8)$$

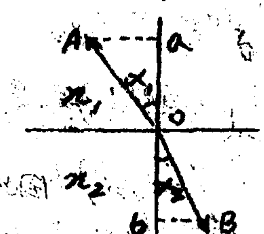
或根据 $v_g=c^2\hbar k/\hbar\omega=c^2/(\omega/k)=c^2/u$

即 $$uv_g=c^2 \qquad (9)$$

不难看出 $u>c$，$v_g<c$

6、(1)试用Fermat最短光程原理，导出光的折射定律：

$$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$$



(图1-4)

(2)光的波动说的拥护者曾经向光的微粒说者提出过下列非难：如认为光是"粒子"，按最小作用原理，$\delta\int p\,dl=0$，若认为$p=mv$，则$\delta\int v\,dl=0$。P指"粒子"动量，V指"粒子"

速度，这将导致下列折射定律，$n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$，这明显违反实验事实。即使改虑相对论效应，对于自由粒子，$p=Ev/c^2$仍然成立，E是粒子能量，从一种介质到另一种介质，E不改变，因此仍然得到$\delta\int v\,dl=0$，矛盾依然存在。你怎样解决这个矛盾？

〔解〕：(1) 如图，光线自介质1中的A点，经过界面上的O点，到介质2中的B点。所历光程为

$$\int_A^B n\,dl=n_1 a\sec\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2 \tag{1}$$

A与B点固定，变动O点，

$$\delta\int_A^B n\,dl=n_1 a\sec\alpha_1\, tg\alpha_1\,\delta\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2\, tg\alpha_2\,\delta\alpha_2=0 \tag{2}$$

但

$$a\, tg\alpha_1+b\, tg\alpha_2=\text{固定值} \tag{3}$$

两边取导数得：

$$a\sec^2\alpha_1\,\delta\alpha_1+b\sec^2\alpha_2\,\delta\alpha_2=0 \tag{4}$$

(2)式与(4)式改写成：

$$n_1 a\sec\alpha_1\, tg\alpha_1\,\delta\alpha_1=-n_2 b\sec\alpha_2\, tg\alpha_2\,\delta\alpha_2 \tag{2'}$$

$$a\sec^2\alpha_1\,\delta\alpha_1=-b\sec^2\alpha_2\,\delta\alpha_2 \tag{4'}$$

两式相除，得：

$$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2 \tag{5}$$

(2) 光的波动说的拥护者提出：若光是微粒，则其运动应按Maupertius的最小作用原理来支配，即$\delta\int p\,dl=0$。按牛顿力学，粒子动量p=粒子质量(常数)×v。因此又可得出$\delta\int v\,dl=0$。于是与(1)相同，可得出$v_1\sin\alpha_1=v_2\sin\alpha_2$，其中$v_1$与$v_2$分别是光微粒在介质1与2中的速度。但$v_1=c/n_1$，$v_2=c/n_2$，因此$n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$。与折射定律完全矛盾。

若按相对论力学，粒子的动量$p=Ev/c^2$是成立的〔见第(5)题(2)式〕。光微粒从一介质到另一介质，能量E是不改变

的。即E不变。因此 $\delta\int p\,dl=0$，仍将导致 $\delta\int v\,dl=0$，矛盾依然存在。

但按德·布罗意假定，可导出波的相速 u 与群速 v_g 有下列关系：

$u v_g=c^2$（见上题）。而粒子速度 $v=$ 波的群速 v_g。所以 $p=Ev/c^2=E v_g/c^2=\hbar\nu/u=\hbar\nu/(c/n)=\hbar\nu n/c$。因此 $\delta\int p\,dl=0$ 将导致 $\delta\int n\,dl=0$。这样就可以得出正确的折射定律了。解决这个矛盾的关键是利用了德·布罗意波关系。

7. 当势能 $V(r)$ 改变一个常量 C 时，即 $V(r)\longrightarrow V(r)+C$，粒子的波函数与时间无关部分改变否？能量本征值改变否？

〔答〕：波函数的与时间无关部分不改变。

能量本征值 $E\longrightarrow E+C$。

8. 设粒子势能 V 的极小值为 V_{min}，证明粒子的能量本征值 $E_n>V_{min}$

〔证〕：利用 $\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}$，$\overline{V}$ 是势能平均值，$\overline{T}$ 为动能平均值

$$\overline{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\nabla^2\psi\,d^3x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)]\,d^3x.$$

第一项可化为面积分，而在无穷远处波函数要求为零。

所以 $\overline{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2\,d^3x\geq 0$

又 $\overline{V}>V_{min}$。

所以 $\overline{E}>V_{min}$

以上 ψ 是任意的，若 ψ 为某一个能量本征态 ψ_n，则 $\overline{E}=E_n$，因而 $E_n>V_{min}$（n 任意）。

9. 设粒子在势场 $V(r)$ 中运动：

(1)、试证明，其能量平均值为：

$$E=\int W d^3x=\int d^3x\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi\right]。$$

W称为能量密度。

(2) 证明能量守恒公式

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\nabla\cdot S=0$$

其中：$S=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right)$ 是能流密度。

〔证〕(1) 粒子能量平均值为（设 ψ 已归一化）

$$E=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi d^3x=\overline{T}+\overline{V}$$

$$\overline{V}=\int\psi^* V\psi d^3x \qquad \text{（势能平均值）}$$

$$\overline{T}=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi d^3x \qquad \text{（动能平均值）}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)]d^3x$$

其中第一项可化为面积分，而在无穷远处归一化的~~波函数必须~~为零。因此：

$$\overline{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi d^3x$$

(2) 利用 $W=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi$

所以
$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\dot\psi^*\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\dot\psi\right]+\dot\psi^* V\psi+\psi^* V\dot\psi$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla\cdot(\dot\psi^*\nabla\psi+\dot\psi\nabla\psi^*)-(\dot\psi^*\nabla^2\psi+\dot\psi\nabla^2\psi^*)\right\}$$

$$+\dot\psi^* V\psi+\psi^* V\dot\psi$$

$$=-\nabla\cdot S+\dot\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi+\dot\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi^*$$

$$=-\nabla\cdot S.$$

（利用了薛定谔方程）

因此
$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot S=0$$

10. 证明，从单粒子的薛定谔方程得出的粒子流的速度场是非旋的。

〔证〕：按薛定谔方程可导出几率守恒方程

$$\nabla\cdot j+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \quad 其中\ \rho=\psi^*\psi$$

$$j=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

相应的速度场：$\vec{v}=\vec{j}/\rho$

本题要求证 $\nabla\times\vec{v}=0$

量子力学中波函数一般为复数，令 $\psi=u+iw$ 则不难证明

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{m}(u\nabla w-w\nabla u)$$

$$\rho=u^2+w^2$$

因此 $\nabla\times\vec{v}=\nabla\times(\vec{j}/\rho)=\frac{1}{\rho}\nabla\times\vec{j}+(\nabla\frac{1}{\rho})\times\vec{j}$

而 $\nabla\times\vec{j}=\frac{2\hbar}{m}(\nabla u)\times(\nabla w)$

$$(\nabla\frac{1}{\rho})\times\vec{j}=-\frac{1}{\rho^2}(\nabla\rho)\times\vec{j}=-\frac{2\hbar}{m\rho}(\nabla u)\times(\nabla w)$$

因此 $\nabla\times\vec{v}=0$

11. 设 ψ_1 与 ψ_2 是薛定谔方程的任意两个解。证明：

$$\int\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t)d^3x \text{ 与时间无关。}$$

〔证〕：按薛定谔方程：

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

取复数共轭 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_1^* \quad (V^*=V)$ ---(1)

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

$\psi_2\times(1)-\psi_1^*\times(2)$ 得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1^*\psi_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)$$

对全空间积分：

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int \psi_1^*(\vec{x},t)\psi_2(\vec{x},t)\,d^3x$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)d^3x$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)-(\nabla\psi_2)\cdot(\nabla\psi_1^*)+(\nabla\psi_1^*)\cdot(\nabla\psi_2)]d^3x$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\int\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)d^3x$$

最后式子可以化为面积分，按波函数在无穷远处要求为零的条件，积分为零。即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi_1^*(\vec{x},t)\psi_2(\vec{x},t)d^3x=0,$$ 即积分与时间无关。

12、考虑单粒子的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_1(x)+iV_2(x))\psi$$

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

〔证〕：上述薛定谔方程取复数共轭

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_1-iV_2)\psi^* \qquad (2)$$

$\psi^*\times(1)-\psi\times(2)$，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)+2i\psi^*V_2\psi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2iV_2\psi^*\psi$$

即 $$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\frac{-\hbar}{2im}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+\frac{2V_2}{\hbar}\psi^*\psi \quad --- \qquad (3)$$

或 $$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=\frac{2V_2}{\hbar}\rho\neq0 \quad ---- \qquad (4)$$

此即几率不守恒的微分表达式。

(3)式对空间体积Ω积分：

$$\frac{d}{dt}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x=-\frac{\hbar}{2im}\iiint_\Omega\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)d^3x+\frac{2V_2}{\hbar}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x$$

$$=-\frac{\hbar}{2im}\oint_S(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\cdot d\vec{S}+\frac{2V_2}{\hbar}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x \quad --- \qquad (5)$$

上式中右边第一项代表单位时间内粒子经过表面进入Ω的几率，

而第二项代表在Ω体积中"产生"的几率，这一项表征几率(或粒子数)不守恒。

13、对于一维运动的自由粒子，设 $\psi(x,0)=\delta(x)$，求 $|\psi(x,t)|^2$。

[解]：为计算方便，进行富氏分析

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

$$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)e^{-ipx/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)e^{-ipx/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

然后代入：$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$，$E=p^2/2m$

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

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\frac{t}{2m\hbar}(p^2-\frac{2mpx}{t})}dp$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{it}{2m\hbar}(p-\frac{mx}{t})^2}dp$$

令 $\xi^2=\frac{t}{2m\hbar}(p-\frac{mx}{t})^2$，

上式化为：$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi$，

利用Fresnel积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cos(\xi^2)d\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin(\xi^2)d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

可知 $$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot(1-i)=\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}$$

∴ $$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}$$

$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}e^{i(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\pi/4)}$$

因而 $$|\psi(x,t)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar t}。$$

14. 在非定域势中粒子的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x},t)+\int d^3x'\,V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)\cdots\cdots(1)$$

求几率守恒对非定域势的要求。此时，只依赖于波函数ψ在空间一点的值的几率流是否存在？

〔解〕：在(1)式中，若 $V(\vec{x},\vec{x}')=V(\vec{x})\delta(\vec{x}-\vec{x}')$（定域势）$\cdots(2)$

则方程退化为平常习见的薛定谔方程

$(1)^*$为：$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)+\int d^3x'V(\vec{x},\vec{x}')^*\psi^*(\vec{x}',t)$ (3)

$\psi^*(\vec{x},t)\times(1)-\psi(\vec{x},t)\times(3)$得：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{x},t)|^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^*(\vec{x},t)\nabla^2\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)\right]$$
$$+\int d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]$$
$$------(4)$$

积分$\int d^3x$：$\frac{d}{dt}\int|\psi(\vec{x},t)|^2d^3x=\frac{i\hbar}{2m}\int d^3x\left[\psi^*(\vec{x},t)\nabla^2\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)\right]$

$$-\frac{i}{\hbar}\iint d^3x\,d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]$$
$$--------(5)$$

对全空间积分，几率守恒要求左$=0$，右边第一项可化为面积分，对于任何真实的波函数，面积分为零。因此要求：

$$\iint d^3x\,d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]=0.$$

括号中后一项换一下积分变数$\vec{x}\longleftrightarrow\vec{x}'$，则

$$\iint d^3x\,d^3x'\,\psi^*(\vec{x},t)\left[V(\vec{x},\vec{x}')-V^*(\vec{x}',\vec{x})\right]\psi(\vec{x}',t)=0\cdots\quad(6)$$

ψ为任意态，因此要求 $V(\vec{x},\vec{x}')=V^*(\vec{x}',\vec{x})$ $\cdots$ (7)

$V(\vec{x},\vec{x}')$是V在坐标表象中的"矩阵元"，上式相当于要求V为厄密算符。

此时，只依赖于波函数在空间一点的值的几率流不存在。

从(4)式可以看出，若令

$$\rho(\vec{x},t)=\psi^*(\vec{x},t)\psi(\vec{x},t) \quad ------$$

$$\vec{j}_0(\vec{x},t)=\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\vec{x},t)\nabla\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla\psi^*(\vec{x},t)]$$

则
$$\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}+\int d^3x'\{\delta(\vec{x}-\vec{x}')\nabla'\cdot\vec{j}_0(\vec{x}',t)$$
$$-\frac{i}{\hbar}[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\cdot$$
$$\psi^*(\vec{x}',t)]\} \quad ------ \qquad (9)$$

上式{ }中第二项是非定域的，不能用空间一个点的波函数的值来表达。

2、一维定态问题

1. 对于无限深势井中运动的粒子，证明

$$\overline{x}=\frac{a}{2} \qquad \overline{(x-\overline{x})^2}=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right)$$

并证明当 $n\longrightarrow\infty$，上述结果与经典结论一致。

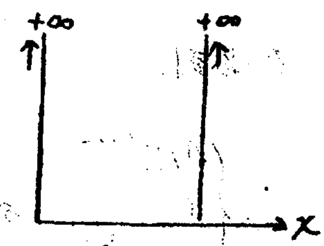


图 1

证：设粒子处于第 n 个本征态，其本征函数为：$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

$$\therefore\ \overline{x}=\int_0^a x\cdot|\psi_n|^2dx$$
$$=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx$$
$$=\frac{2}{a}\int_0^a\frac{1}{2}x\cdot\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)dx$$
$$=\frac{a}{2} \qquad (1)$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2$$
$$=\int_0^a x^2|\psi_n|^2dx-\frac{a^2}{4}$$
$$=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\cdot\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)dx-\frac{a^2}{4}$$
$$=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right) \qquad (2)$$

在经典情况下，在区域（0，a）中粒子处于dx范围中的几率为$\frac{dx}{a}$

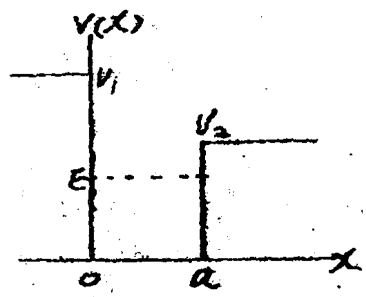
$$\therefore\quad \overline{x}=\int_0^a x\cdot\frac{dx}{a}=\frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2}=\int_0^a x^2\cdot\frac{dx}{a}=\frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}$$

∴ 当$n\to\infty$，量子力学的结果与经典的一致。

2、试求在不对称势井（图2）中的粒子的能级与波函数。



解：仅讨论分立能级的情形，

即 $E<V_2$

这时，薛定谔方程可表为

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

考虑到$x\to\pm\infty$，$\psi\to 0$。我们有解：

$$\psi=\begin{cases}A_1e^{k_1x} & x<0 & k_1=\frac{\sqrt{2m(V_1-E)}}{\hbar}\\ A\sin(kx+\delta) & 0<x<a & k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\\ A_2e^{-k_2x} & a<x & k_2=\frac{\sqrt{2m(V_2-E)}}{\hbar}\end{cases}\quad (\delta<\pi)$$

由$\frac{d\ln\psi}{dx}$在$x=0$，a处连续条件，得出

$$k_1=k\,ctg\,\delta$$

$$k_2=-k\,ctg(ka+\delta)\qquad (1)$$

由(1)式得：$\sin\delta=\hbar k/\sqrt{2mV_1}$

$$\sin(ka+\delta)=-\hbar k/\sqrt{2mV_2}$$

$$\therefore\quad ka=n\pi-\sin^{-1}\hbar k/\sqrt{2mV_1}-\sin^{-1}\hbar k/\sqrt{2mV_2}\qquad (2)$$