

试论量子力学中的波包、群速度和相速度

柳继锋

(物理系)

摘要

此文详细论述用波包、群速度和相速度描述微观粒子的概念,指出波包描述法的优点和不足,说明它和经典描述的关系。从而表明波包描述法是有一定意义和价值的。

关键词: 波包, 群速度, 相速度

对于波包、群速度和相速度描述微观粒子体系方法的评价是有争议的。目前我国大多数量子力学的教材都采用几率来描述微观粒子的运动状态,这种方法不涉及粒子的运动过程及粒子的结构,因而很成功,但也很抽象,用波包、群速度和相速度描述微观粒子的方法却很少提到,甚至避而不谈。而国外的量子力学参考书则不然,它是作为几率描述方法的补充。本文想探讨一下波包、群速度和相速度是如何描写微观粒子的,及这种描述方法的优点与不足。

1 用波包描述微观粒子的波动性

自由粒子是由单色的平面波即德布罗意波来描述的,单色的平面波即要求波长和频率都是一定的。但事实上很多波的波长和频率总有一定的宽度。例如:电子衍射实验中得到的衍射条纹总是有一完全确定的宽度,说明电子波不是单色波,而是频率相近的一群波。因此再用德布罗意波来描述电子波欠精确,用波包来讨论具有一定的意义。

波群是指频率彼此较接近的若干个波的迭加,这个近单色波群的包迹称为波包。用波包来描述微观粒子基本思想是:用平面波迭合成一个波包,然后用群速度、相速度来反映微观粒子的运动状态。

群速度是指波群的中心速度,就是波群移动的速度。波包的最大振幅是波包中心,各个波在这点发生相长干涉形成了波包的最大振幅。按波包的定义,描述波包的波函数 $\Psi(x, t)$ 可写成:

$$\Psi(x, t) = \int_{K_0 - \Delta K}^{K_0 + \Delta K} c(K) e^{i(\omega t - Kx)} dK$$

其中 $K_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ 是波数,经过简单运算后也可写成:

本文于1988年10月收到。

$$\Psi(x, t) = c(x, t) e^{i(\omega t - Kx)}$$

$$\text{而 } c(x, t) = A \frac{\sin \eta}{\eta}, \quad \eta = \left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0 t - x \Delta K.$$

当 $\eta = 0$ 时,

$$c(x, t) = \lim_{\eta \rightarrow 0} A \frac{\sin \eta}{\eta} = A$$

就是波包的最大振幅。

由 η 的定义式可知, 当 $\eta = 0$ 时得,

$$\left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0 t - x = 0,$$

即

$$x = \left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0 t$$

故群速度 V_g 为:

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0$$

又因为

$$\omega = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar K^2}{2m_0} + \dots$$

代入上式略去高次项得

$$v_g = \frac{\hbar K}{m_0}$$

以 $p = \hbar K$ 和 $p = m_0 v$ 代入上式得到一个重要结论:

$$v_g = \frac{\hbar K}{m_0} = \frac{pv}{p} = v$$

它表明群速度 v_g 与粒子运动速度 v 相等。因而波包是能够迁移粒子和能量的, 这就解决了粒子运动的单色波不能迁移粒子和能量的矛盾。把这个结论推论到三维 $\vec{v}_g = \vec{v}$ 。

相速度和群速度是不同的, 相速度是 ω 和 k 确定时, 位相不变的那一点的运动速度。在德布罗意波 $\Psi(x, t) = A e^{i(\omega t - Kx)}$ 中, $(\omega t - Kx)$ 是波的周相。考虑某一点 x , 在这点上波的周相具有确定值, 设为 a , 即,

$$a = \omega t - Kx$$

由此可求得周相 a 在空间的相速度 u :

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{K} = \frac{E}{p}$$

以 v_g 值代入上式得到相速度和群速度的关系为:

$$v_g = K \left(\frac{du}{dK} \right)_{K=K_0} + u$$

如果没有色散现象, 则 $\frac{du}{dK} = 0$, 得 $v_g = u$, 表明在没有色散的情况下群速度和相速度

相等, 在一般有色散的情况下群速度和相速度是不一致的。

由上分析可知, 用波包来描述粒子的情况即为: 相速度 u 反映了波包中某一单色平面波

运动,相速度 u 与波数 K 有关。而群速度 v_g 恰好等于粒子运动的实际速度 v ,波包的运动方向和速度都与粒子的运动相同,所以用波包来描述微观粒子时有很好的直观性。

2 波包描述法与经典方法的关系

整个波包运动的群速度丝毫不差地与粒子本身的运动相同。因此可推知,如果波包 $|\Psi|^2$ 的运动可以看作是服从牛顿力学的质点运动,那么波包的形状就不改变,且可得波包重心 (\bar{x}) 的牛顿方程:

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = - \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x} \quad (1)$$

此式成立的近似条件为 $\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x}$, $U(x)$ 为势函数。实际上,在宏观范围内,场的变化

很小,因而波包 Ψ 波的折射率变化很小,故认为波群几乎具有点的特点,粒子平均势能实际上就等于处于波包中心的质点的势能:

$$\bar{U} = \int \Psi^* U \Psi dx \approx U(\bar{x})$$

现在来简单推导(1)式,在任何一个态 Ψ 中,对力学量的平均值而言有下式成立。

$$m \frac{d^2}{dt^2} (\bar{x}) = - \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} \quad (2)$$

设 $\Delta x = x - \bar{x}$, $x = \bar{x} + \Delta x$,在 $x \sim \bar{x}$ 附近对 $\frac{\partial U}{\partial x}$ 进行台劳展开

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(x)}{\partial x} &= \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x} + (x - \bar{x}) \frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial x^2} + \frac{1}{2!} (x - \bar{x})^2 \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial x^3} + \dots \\ &= \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x} + \Delta x \frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial x^2} + \frac{1}{2!} (\Delta x)^2 \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial x^3} + \dots \end{aligned}$$

因此 $\frac{\partial U(x)}{\partial x}$ 的平均值为

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial U(x)}{\partial x}} &= \int \Psi^*(x, t) \frac{\partial U}{\partial x} \Psi(x, t) dx \\ &= \overline{\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial x^2} \Delta x} + \frac{1}{2!} \overline{\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial x^3} (\Delta x)^2} + \dots \end{aligned}$$

由于 $\overline{\Delta x} = \int \Psi^*(x - \bar{x}) \Psi dx = 0$

以 $\frac{\overline{U(x)}}{\overline{\partial x}}$ 代入 (2) 式得:

$$m \frac{d^2 \overline{x}}{dt^2} = - \frac{\partial U(\overline{x})}{\partial x} - \frac{1}{2!} \frac{\partial^3 U(\overline{x})}{\partial x^3} \Delta x^2 - \dots$$

若要求①式成立就必须:

$$\frac{1}{2} \left| \frac{\partial^3 U(\overline{x})}{\partial x^3} \right| (\Delta x)^2 \ll \left| \frac{\partial U(\overline{x})}{\partial x} \right|$$

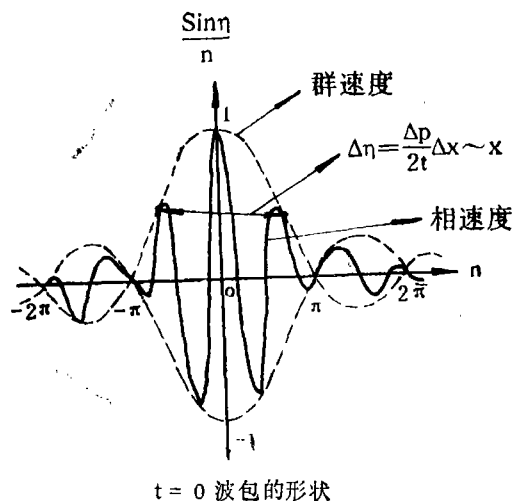
由此式分析波包运动在势能变化缓慢、波包很窄、粒子能量又大的情况下服从牛顿力学的质点运动。因而这时用波包、群速度和相速度描写粒子运动是极为方便和较好的。实际满足以上条件时,普朗克常数不起什么作用可以略去。在量子力学中,这样的态就用波包来描写,而薛定谔波动方程决定了这样的波包如何随时间变化。为此,为使经典描述有效,波包应很窄,形状保持不变,反过来就得到这样结论:当波包很窄,形状保持不变,波包的描述才能更好地说明粒子运动过程和状态,这种描述也接近经典的描述。

3 波包描述法的优点与不足

由前面论述波包描述粒子的情况及它和经典方法关系可以看出以下优点:

1) 用波包、群速度和相速度描写微观粒子的波粒二象性是十分直观、形象和简单的,它们能很好地描写粒子的运动过程和状态。下面再图示说明这方面情况,根据波包的波函数

$$\begin{aligned} \Psi &= c(x, t) e^{i(\omega_0 t - K_0 x)} \\ &= 2c(K_0) \frac{\sin \left\{ \left[\left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0 t - x \right] \Delta k \right\}}{\left(\frac{d\omega}{dK} \right)_0 t - x} e^{i(\omega_0 t - K_0 x)} \end{aligned}$$



可把 $t=0$ 时刻的波包形状和群速度及相速度用图表示 (见左图), 图中虚线为波包形状, 实线为单色波群。

由图可直观、形象地看出波包的大小和形状, 振幅反映了粒子在空间运动中所体现出来的波动性, 波包运动的群速度 $v_g = v$ 及波包的强度即几率 $\rho = |\Psi(x, t)|^2$, 反映了粒子运动的状态, 知道了 v_g 及 ρ 的大小就知道粒子某时刻在空间某处的运动状态, 特别是波包的重心 (即它的主极大) 以粒子的速度运动 ($v_g = v$), 所以波包可以描写粒子的定位, 因而能直观地反映粒子的运动过

程和位置,同时还可了解到粒子的运动情况。

与此相比,统计解释只考虑粒子在空间某处出现的几率与波函数的关系,从而确定粒子的运动状态,这种方法只能抽象地体现粒子运动过程中的波粒二象性,因为它只考虑粒子某一时刻某一处的状态,而波包运动代表了粒子的整体运动,也表示了波群的集体行为,波包的衍射能直接反映粒子的衍射结果。

2) 波包可以很容易得出测不准关系式。由图可知,波包振幅的表示式 $B(\eta)$
$$= A \frac{\sin \eta}{\eta}$$
, 很容易看出,这个振幅在点 $\eta = 0$ 处达到最大值 $B(0) = A$, 而在点 $\eta = \pi$

处这个振幅为零: $B(\pi) = 0$, 所以在 $t = 0$ 时,波包可以认为局限在第一个极大区域中,即在

$$\Delta \eta = \frac{\Delta p}{2 \hbar} \Delta x \sim \pi$$

区域中,由此得出的关系式

$$\Delta p \Delta x \sim h$$

称为测不准关系。

3) 对接近单色波,用波包来描述粒子的运动状态具有很大的优越性,由于相速度 $u = \frac{\omega}{K}$, 它反映了 u 与 K 和波长 λ 有关,因而描述单粒子运动的波会在真空中发生色散,色散的结果,就是各个波不具有完全确定的频率和纯粹的单色波,而是近单色波,用波包来描写,则粒子在空间某处出现的几率为 $|\Psi|^2$ 。如果这时用单色波来描述粒子运动状态则是不准确的。

波包、群速度和相速度描述粒子运动的方法取得了一定的成功,但也存在不足方面。

1) 波包实际上是扩散的。因为前面所述,形成波包的每一个单色波的相速度依赖于波数或动量 P , 所以每一个单色波将以自己的速度传播着,使得波包形状随时间改变,也就是使波包发生扩散,然而这样的粒子是不稳定的,显然这与实验事实有矛盾的。

2) 群速度 $v_g = \frac{\hbar K}{m_0} = v$ 是在把 ω 中的高次项略去(第三项以后)情况下代入

$v_g = \left(\frac{d\omega}{dK} \right)$ 。中得出的,如果不能忽略这些高次项,则 $v_g \neq v$, 随时间的推移,波包变

形散开,以致整个波包不再以群速度 v_g 运动。

3) 波包、群速度和相速度的描述方法是一种近似经典的描述方法。因为,就波包的位置和动量的平均值而论,它总象是一个经典粒子那样运动。在波包的扩散可以忽略时,波包描述法才适用,这时量子过渡到经典。

综上所述,波包描述法能直观、形象和简单地描写粒子的运动过程,在一定条件下可以忽略波包扩散。把这种描述方法和统计解释的描述方法结合起来就可完全描述粒子的运动过程和运动状态,尽管有些不足,但波包描述方法还是在微观描述中有一定的意义和价值的。

参 考 文 献

- 1 布洛欣彩夫著, 叶蕴理等译. 量子力学原理. 人民教育出版社, 1956
- 2 A.A. 索科洛夫等著, 王祖望译. 量子力学原理及其应用. 上海: 科技出版社, 1983
- 3 曾谨言. 量子力学下册. 科学出版社, 1982
- 4 玻姆著, 侯德彭译. 量子理论. 北京: 商务印书馆, 1982
- 5 L.I. 席夫著, 李淑娴等译. 量子力学. 人民教育出版社, 1981
- 6 德布罗意著, 谢毓章译. 非线性波动力学. 上海: 科技出版社, 1966
- 7 史包尔斯基著. 原子物理学. 高等教育出版社, 1954

DISCUSSION ON WAVE PACKET, GROUP VELOCITY AND PHASE VELOCITY IN QUANTUM MECHANICS

Liu Jifeng

(*Department of Physics*)

Abstract

In this paper the conception of describing the microcosmic particles with wave packet, group velocity and phase velocity is stated in detail, and the virtues and defects of wave packet method are pointed out. The relation between this method and classical method is also explained. It shows that the wave packet method is of sufficient meanings and values.

Key Words: wave packet, group velocity, phase velocity