Д.4. Фазовая и групповая скорости волн де Бройля

Для нерелятивистского электрона с энергией E и с постоянной потенциальной энергией V дисперсионное соотношение (см. п.Д.2) имеет вид

$$\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}+\frac{V}{\hbar}. \tag{1}$$

Фазовая скорость равна

$$v_ф(k)=\frac{\omega}{k}=\frac{\hbar k}{2m}+\frac{V}{\hbar k}. \tag{2}$$

Скорость классической частицы равна p/m, т. е. $\hbar k/m$. Таким образом, уравнение (2) может быть записано как

$$v_ф(k)=\frac{1}{2}v\ (\text{частицы})+\frac{V}{p\ (\text{частицы})}, \tag{3}$$

что является специфическим выражением. К счастью, $v_ф(k)$ нельзя наблюдать непосредственно. Скорость квантовомеханической частицы определяется скоростью волнового пакета, составленного из нескольких близких значений k, а не из одного значения k. Скорость же распространения волнового пакета определяется групповой скоростью $v_{гр}$. Используя уравнение (1), имеем

$$v_{гр}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0=\left(\frac{\hbar k}{m}\right)_0, \tag{4}$$

где индекс нуль означает, что производная должна вычисляться для k, лежащего в центре полосы Δk, формирующей пакет. Таким образом, мы видим, что $v_{гр}=v$ (частицы), если взять импульс частицы $(\hbar k)_0$, соответствующий центру пакета.

Для свободных релятивистских частиц энергия, импульс и масса покоя связаны следующим образом:

$$E^2=(mc^2)^2+(cp)^2, \tag{5}$$

что дает следующее дисперсионное соотношение (напоминаем, что $E=\hbar\omega$ и $p=\hbar k$):

$$\hbar^2\omega^2=(mc^2)^2+(\hbar ck)^2. \tag{6}$$

Фазовая скорость $v_ф=\omega/k$ имеет значение $v_ф=\omega/k=E/p$, которое равно c^2/v (частицы), т. е. больше, чем c. Групповая скорость равна

$$v_{гр}=\frac{d\omega}{dk}=\frac{c^2k}{\omega}=\frac{c^2p}{E}=v\ (\text{частицы}). \tag{7}$$

Соотношение между фазовой скоростью, групповой скоростью и скоростью света такое же, как и для радиоволн в ионосфере, а именно $v_ф v_{гр}=c^2$. Это происходит из-за подобия дисперсионных соотношений.

Д.5. Волновое уравнение для волн де Бройля

Гармоническая волна де Бройля (т. е. стационарное состояние) в области постоянного потенциала имеет вид

$$\psi(z,\ t)=e^{-i\omega t}(Ae^{ikz}+Be^{-ikz}). \tag{1}$$

Тогда

$$\frac{\partial\psi(z,\ t)}{\partial t}=-i\omega\psi(z,\ t), \tag{2}$$

$$\frac{\partial^2\psi(z,\ t)}{\partial t^2}=-\omega^2\psi(z,\ t), \tag{3}$$

$$\frac{\partial\psi(z,\ t)}{\partial z}=e^{-i\omega t}(ikAe^{ikz}-ikBe^{-ikz}), \tag{4}$$

$$\frac{\partial^2\psi(z,\ t)}{\partial z^2}=-k^2\psi(z,\ t). \tag{5}$$

Для нерелятивистских частиц дисперсионное соотношение (см. п.Д.2) имеет вид

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V. \tag{6}$$

Умножая уравнение (2) на $i\hbar$ и используя уравнения (5) и (6), получаем

$$\frac{i\hbar\,\partial\psi(z,\ t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(z,\ t)}{\partial z^2}+V\psi(z,\ t). \tag{7}$$

Уравнение (7) было выведено с помощью гармонических волн, являющихся его решением для постоянного потенциала. Однако нет причин для того, чтобы это уравнение было несправедливо и в случае, когда $V=V(z)$, т. е. если потенциал зависит от положения. Именно Шредингер предположил, что уравнение (7) остается справедливым в случае, когда $V(z)$ не постоянно. Уравнение (7) с $V=V(z)$ называется *уравнением Шредингера* (более точно, одномерным уравнением Шредингера). Оно широко применяется в атомной физике.

Когда нельзя пренебречь релятивистскими эффектами, уравнения (6) и (7) неприменимы. Для свободных релятивистских частиц дисперсионное соотношение имеет вид

$$\hbar^2\omega^2=\hbar^2c^2k^2+(mc^2)^2. \tag{8}$$

Умножая уравнение (8) на $-\hbar^2\psi(z,\ t)$ и используя уравнения (3) и (5), мы получаем

$$\frac{\partial^2\psi(z,\ t)}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2\psi(z,\ t)}{\partial z^2}-\frac{(mc^2)}{\hbar^2}\psi(z,\ t). \tag{9}$$

Уравнение (9) называется *уравнением Клейна — Гордона*. Обратите внимание, что если мы положим $m=0$, то получим классическое волновое уравнение для недиспергирующих волн, распространяющихся со скоростью c. Это соответствует тому, что фотон имеет нулевую массу покоя.

Д.6. Электромагнитное излучение одномерного «атома»

Прежде всего снова прочтите пункт Д.2. Рассмотрим установившиеся состояния для электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, координаты которых $z=-L/2$ и $z=+L/2$. Предположим далее, что состояние электрона определяется суперпозицией основного состояния и первого возбужденного состояния:

$$\psi(z,\ t)=\psi_1(z,\ t)+\psi_2(z,\ t), \tag{1}$$

$$\psi_1(z,\ t)=A_1e^{-i\omega_1t}\cos k_1z,\qquad k_1L=\pi, \tag{2}$$

$$\psi_2(z,\ t)=A_2e^{-i\omega_2t}\sin k_2z,\quad kL=2\pi. \tag{3}$$

Вероятность (на единицу длины) нахождения электрона в положении z в момент времени t равна

$$|\psi(z,\ t)|^2=|A_1e^{-i\omega_1t}\cos k_1z+A_2e^{-i\omega_2t}\sin k_2z|^2=$$
$$=A_1^2\cos^2k_1z+A_2^2\sin^2k_2z+2A_1A_2\cos k_1z\sin k_2z\cos(\omega_2-\omega_1)\,t. \tag{4}$$

Мы видим, что выражение для вероятности имеет член, который совершает гармонические колебания с частотой биений между двумя боровскими частотами ω_1 и ω_2. Взяв написанные ниже интегралы, легко получить выражение для $\bar{z}$ — среднего в пространстве значения z:

$$\int_{-L/2}^{+L/2}|\psi|^2dz=(A_1^2+A_2^2)\frac{L}{2},\qquad \int_{-L/2}^{L/2}z|\psi|^2dz=\frac{16L^2}{9\pi^2}A_1A_2\cos(\omega_2-\omega_1)\,t,$$

$$\bar{z}=\frac{\int z|\psi|^2dz}{\int|\psi|^2dz}=\frac{32L}{9\pi^2}\frac{A_1A_2}{A_1^2+A_2^2}\cos(\omega_2-\omega_1)\,t,$$