

С помощью формул (2,9), (2,10) и (2,11) можно найти закон дисперсии волн де Бройля

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (2,14)$$

Соответствующая фазовая и групповая скорости равны

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \quad (2,15)$$

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{1}{m} p. \quad (2,16)$$

Формула (2,16) показывает, что групповая скорость волн де Бройля совпадает с обычной скоростью макроскопической частицы. Если бы мы взяли за исходное выражение для скорости частицы величину $v_{\text{гр}}$, то соотношение между энергией и частотой (2,11) можно было получить как следствие этого определения. Фазовая скорость волн де Бройля v_ϕ не имеет непосредственного физического смысла. Это становится особенно ясным, если воспользоваться релятивистским выражением для связи энергии с импульсом частицы

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

При этом

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 k^2}} > c,$$

т. е. v_ϕ больше скорости света.

§ 3. Принцип суперпозиции. Разложение по плоским волнам¹⁾

Выше мы рассматривали явление дифракции электронов на экране с ограниченным числом щелей. Фактически, однако, наблюдается дифракция электронов от кристаллической решетки. Этот случай дифракции имеет не только практический, но и большой принципиальный интерес.

Мы видели в § 36 ч. IV, что селективное отражение рентгеновых лучей имеет место при выполнении условий Брэгга — Вульфа. Если отвлечься от несущественных деталей, то оказывается, что дифракция электронов на кристаллической решетке происходит аналогично дифракции рентгеновых лучей. При этом в результате рассеяния электронов от монокристаллического образца возникает ряд селективных отражений. Каждое из селективных отражений отвечает определенному импульсу или

¹⁾ При чтении этого параграфа рекомендуем предварительно возвратиться к § 35 ч. I.

в силу (2,10) определенной длины волны. Таким образом, кристаллическая решетка представляет собой прибор, который разлагает исходный некогерентный пучок электронов на ряд пучков, каждый из которых отвечает электронам определенной длины волны.

Мы уже указывали, что опыт с электронным пучком эквивалентен совокупности последовательно произведенных измерений с большим числом электронов, находящихся в тождественных внешних условиях. Поэтому можно сказать, что дифракционная решетка играет роль прибора, который анализирует исходное состояние микрочастицы, разлагая его на совокупность отдельных состояний с определенными значениями импульса. Так как состоянию с определенным импульсом отвечает плоская волна вида (2,12), то, следовательно, в общем случае волновая функция, описывающая исходное состояние электрона, падающего на решетку, может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн, т. е.

$$\psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p_x, p_y, p_z) \psi_p(x, y, z, t) dp_x dp_y dp_z. \quad (3,1)$$

Физически это означает, что волновую функцию электрона в произвольном состоянии можно рассматривать как результат наложения волновых функций, отвечающих состояниям с определенным значением импульса.

Не следует удивляться тому, что один электрон (или другая микрочастица) может находиться в определенном состоянии, не имея при этом вполне определенного значения импульса. Хотя понятием импульса, перенесенным на микрочастицу из классической механики, можно пользоваться в квантовой механике, состояние микрочастицы не задается по тем же законам, что и состояние частицы в классической механике. Мы вернемся к обсуждению вопроса о характеристике состояния микрочастицы в последующих параграфах.

Выбирая коэффициент A в формуле (2,12) в виде (см. § 26)

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (3,2)$$

имеем

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} d\mathbf{p}. \quad (3,3)$$

С математической точки зрения формула (3,3) представляет разложение функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ в интеграл Фурье. Амплитуда $c(\mathbf{p})$ показывает, с каким весом состояние ψ_p представлено

в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$. Согласно равенству Персеваля (см. приложение II, 9), имеем

$$\int |\psi|^2 dV = \int |c|^2 dp. \quad (3,4)$$

При выборе коэффициента A в виде (3,2), в равенстве (3,4) не содержится числовых коэффициентов. Естественно допустить, что $|c(\mathbf{p})|^2$ может быть связано с плотностью вероятности $\rho(\mathbf{p})$ обнаружить у частицы, находящейся в состоянии $\psi(\mathbf{r}, t)$, значение импульса, равное \mathbf{p} . Именно, естественно предположить, что

$$\rho(\mathbf{p}) = |c(\mathbf{p})|^2. \quad (3,5)$$

Мы пишем знак равенства, а не знак \sim (пропорциональности), так как функция ψ нормирована условием (2,2). При этом имеет место равенство (см. (3,4))

$$\int |c(\mathbf{p})|^2 dp = 1. \quad (3,6)$$

Мы вернемся еще к обсуждению формулы (3,5) в § 21.

Равенство (3,3) является частным случаем одного из важнейших положений квантовой механики — принципа суперпозиции. Содержание этого принципа сводится к следующему: если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых функциями $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, то линейная комбинация (суперпозиция) волновых функций ψ_n

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad (3,7)$$

где c_n — произвольные постоянные, также является волновой функцией, описывающей одно из возможных состояний системы. Важность принципа суперпозиции заключается, в частности, в том, что он ограничивает возможные уравнения для определения ψ линейными уравнениями (см. § 6). Если индекс n , характеризующий состояние, пробегает непрерывный ряд значений, то суммирование в формуле (3,7) должно быть заменено интегрированием. В дальнейшем мы вернемся еще к обсуждению понятия «состояние квантовой системы», а также смысла коэффициентов c_n (см. § 21 и 23).

В качестве примера применения принципа суперпозиции рассмотрим свободную частицу, импульс которой не имеет строго определенного значения, но может лежать в малом интервале Δp около значения p_0 , а именно: $p_0 - \Delta p \leq p \leq p_0 + \Delta p$. Для простоты рассмотрим случай одномерного движения. Согласно

(3,3) волновую функцию электрона можно написать в виде

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} c(p) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c'(k) e^{i(kx - \omega t)} dk. \end{aligned} \quad (3,8)$$

Коэффициент A для одномерного движения равен $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$ (ср. § 26). В соответствии с результатами § 35 ч. I разложение (3,8) выражается формулой, совпадающей с (35,2) ч. I,

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} 2c'(k_0) \frac{\sin \left[\Delta k \left(x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right) \right]}{\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right]} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}. \quad (3,9)$$

Формула (3,9) показывает, что суперпозиция волновых функций, отвечающих близким значениям импульсов (или волновых чисел), приводит к образованию волнового пакета, перемещающегося с групповой скоростью

$$v_{гр} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 = \frac{1}{m} p_0.$$

Из вида волновой функции (3,9) ясно, что вероятность обнаружить микрочастицу в точке x в момент времени t , пропорциональная $|\psi(x, t)|^2$, имеет резкий максимум, который движется со скоростью $v_{гр}$.

Необходимо подчеркнуть, что равенство (3,9) носит приближенный характер. Учет последующих членов разложения функции $\omega(k)$ привел бы к выражению для волнового пакета, ширина которого увеличивается со временем. Говорят, что происходит распывание волнового пакета. Факт распывания пакета непосредственно следует из того, что каждая волна, образующая пакет, движется со своей фазовой скоростью $v_{ф} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$.

При появлении квантовой механики делались попытки отождествить электрон с волновым пакетом, построенным из волн де Бройля. Однако факт распывания волнового пакета свидетельствует о несостоятельности подобной трактовки. Кроме того, если бы электрон представлял пакет волн, то при этом, как и в случае одиночной волны, невозможно было бы объяснить опыт с дифракцией одиночных электронов.