波包

步允霆

2023 年 8 月 27 日

1 自由粒子

若一个粒子在空间各点的势能都为零，我们说它是自由的。

当 $V(\mathbf{r},t)=0$，此时的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) \tag{1}$$

显然，这个微分方程具有如下形式的解

$$\psi(\mathbf{r},t)=Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \tag{2}$$

而

$$\omega=\frac{\hbar\mathbf{k}}{2m} \tag{3}$$

我们可以看到

$$|\psi(\mathbf{r},t)|^2=|A|^2 \tag{4}$$

所以一个这种类型的平面波代表一个粒子，它在空间各点出现的概率是一样的。

根据叠加原理，可以得到

$$\psi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\mathbf{k})e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega(k)t]}\mathrm{d}k \tag{5}$$

形如式 (5) 的波函数，即平面波的叠加，叫做一个三维波包。我们接下

来研究平行于 Ox 轴传播的一维波包，即

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}g(k)e^{i[kx-\omega(k)t]}\mathrm{d}k \tag{6}$$

若将这个时刻选为时间的起点，则波函数为：

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)e^{ikx}\mathrm{d}k \tag{7}$$

$g(k)$ 其实就是 $\psi(x,0)$ 的傅里叶变换，即

$$g(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi(x,0)e^{-ikx}\mathrm{d}x \tag{8}$$

因而，式 (7) 的适用范围并不限于自由粒子。

2 波包在指定时刻的形状

假设图 1 是 g(k) 的形状，该曲线有一个明显的高峰，极大值位于 $k=k_0$ 处，它的半高处的宽度为 Δk。

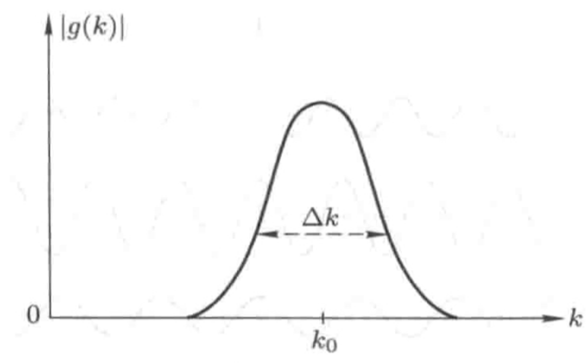

图 1: 函数 $|g(k)|$ 的形状

先考虑一个简单的特例。假设 $\psi(x,0)$ 是三个平面波之和，波矢为 k_0, k_0-

$\frac{\Delta k}{2}, k_0+\frac{\Delta k}{2}$，振幅为 0，0.5，0.5。于是我们有：

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\left[e^{ik_0x}+\frac{1}{2}e^{i(k_0-\Delta k/2)x}+\frac{1}{2}e^{i(k_0+\Delta k/2)x}\right] \\ &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0x}\left[1+\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)\right]\end{aligned} \tag{9}$$

容易看出，在 x=0 处 $|\psi(x)|$ 有极大值。造成这个结果的原因是如下事实：当 x 取此值的时候，三个波是同相位的，因而他们的干涉是相长的，如图 2 所示。在 x 逐渐偏离 0 以后，三个波的相位便有差异，于是 $|\psi(x)|$ 便减小了。当 e^{ik_0x} 和 $e^{i(k_0\pm\Delta k/2)x}$ 之间的相位差等于 $+\pi$ 时，他们的干涉便是完全相消的；当 $x=\pm\Delta x/2$ 时，$\psi(x)$ 等于零，Δx 由

$$\Delta x\cdot\Delta k=4\pi \tag{10}$$

给出。此式表示，函数 $|g(k)|$ 的宽度 Δk 越小，函数 $|\psi(x)|$ 的宽度 Δx(即 $|\psi(x)|$ 的两个零点间的距离) 就越大。

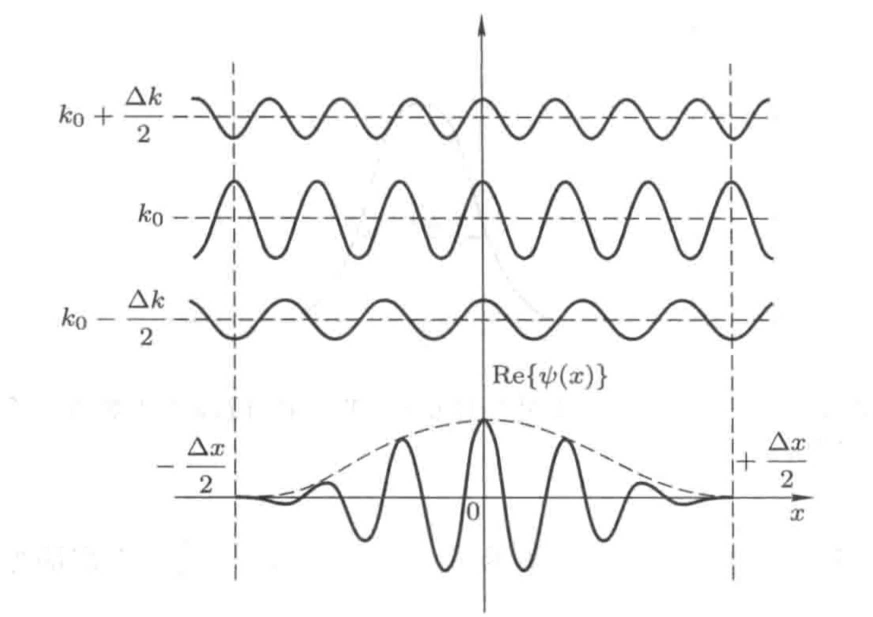

图 2: 三个波的实部

事实上，假设函数 $g(k)$ 的辐角为 $\alpha(k)$，即

$$g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)} \tag{11}$$

如果在 $|\psi(x)|$ 有明显值的区间 $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$ 上，$\alpha(k)$ 的变化是充分正规的，则当 Δk 充分小时，我们可在 $k = k_0$ 附近展开 $\alpha(K)$

$$\alpha(k) \simeq \alpha(k_0) + (k - k_0)\left[\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \tag{12}$$

利用此式，可将式 (7) 重写为

$$\psi(x,0) \simeq \frac{e^{i[k_0 x + \alpha(k_0)]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} \mathrm{d}k \tag{13}$$

其中

$$x_0 = -\left[\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \tag{14}$$

用式 (13) 研究 $|\psi(x,0)|$ 随 x 的变化：当 $|x - x_0|$ 很大时，积分号下 k 的函数在区间 Δk 中有很多次摆动，于是相继各次摆动对积分的贡献互相抵消而使对 k 积分的结果可以忽略，也就是在远离 x_0 的固定点 x 处，构成 $\psi(x,0)$ 的各平面波的相位在 Δk 的范围内变化得非常迅速，这些波便因干涉而相消，见图 3a。反之，若 $x \simeq x_0$，则应对 k 积分的函数实际上并未摆动，因而究 $|\psi(x,0)|$ 有极大值，见图 3b。

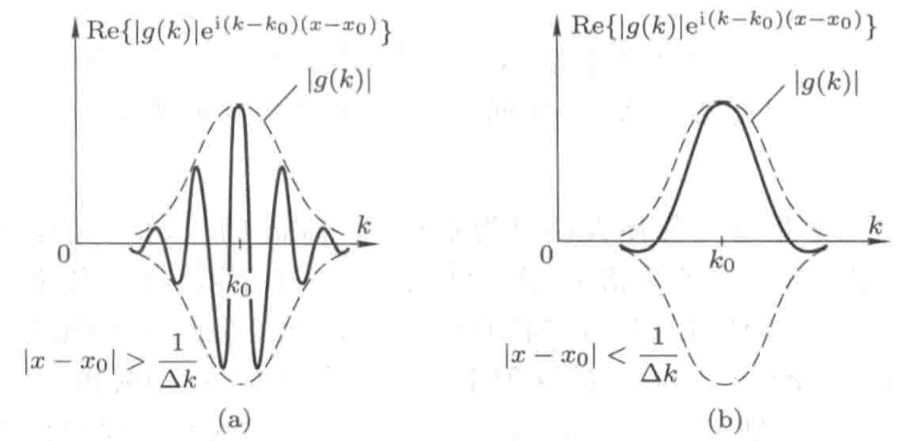

图 3: 为了得到 $\psi(x,0)$ 而需对 k 积分的那个函数随 k 变化的情况

于是波包中心的位置为

$$x_M(0)=x_0=-\left[\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \tag{15}$$

如果振幅最大的那些波，也就是和 k_0 附近的 k 值对应的那些波，是相长干涉的话，那么像公式 (7) 中的那种积分将有极大值。相长干涉发生于下述情况：这些波的依赖于 k 的相位在 $k=k_0$ 附近实际上没有变化。为了得到波包的中心，我们可以认为，相位在 k 的导数在 $k=k_0$ 处等于零 (稳定相位条件)。在上述特例中，和 k 对应的波的相位是 $kx+\alpha(k)$，使得导数 $x+\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}$ 在 $k=k_0$ 处等于零的 x 值就是 $x_M(0)$

当 x 偏离 x_0 时，$|\psi(x,0)|$ 减小；在下述情况下，这种减小更加显著，这种情况是：当 k 取遍区间 Δk 中的值时函数 $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ 大约摆动一次，这种情况对应于

$$\Delta k\cdot(x-x_0)\simeq 1 \tag{16}$$

如果波包的宽度近似地为 Δx，便有

$$\Delta k\cdot\Delta x\gtrsim 1 \tag{17}$$

下界的精准值依赖于宽度 Δx 和 Δk 的定义。

因而，式 (6) 中的波包表示一个粒子的这样一个态：在时刻 t=0，在以 x_0 为中心，近似宽度为 Δx 的区间外，该粒子出现的概率实际上为 0。

3 海森伯不确定性

与一个平面波 $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ 对应的概率密度在任何时刻 t 在 Ox 轴上各点是恒定的，我们可以这样解释：譬如说，在 t=0 时由 $\psi(x,0)=Ae^{ikx}$ 描述的一个粒子具有完全确定的动量，就是说，在这个时刻去测量他的动量一定得到 $p=\hbar k$。由此可见，e^{ikx} 描述对应于 $p=\hbar k$ 的本征态；另一方面，对 k 的每一个实数值都存在一个波函数，因此，对于任意态下的一次动量测量，我们预期得到的本征值应包括所有实数值。

现在来研究式 (7)，在该式中，$\psi(x,0)$ 表现为动量本征函数的线性叠加，e^{ikx} 的系数就是 $g(k)$。于是我们自然要将 $|g(k)|^2$ 解释为：在时刻 t=0 测量 $\psi(x,t)$ 所描述的粒子的动量，得到的结果为 $p=\hbar k$ 的概率。但是，实际上 p 的可能值像 x 的可能值一样，组成一个连续的数集，而 $|g(k)|^2$ 则正比于一种概率密度：测得 p 的数值介于 $\hbar k$ 和 $\hbar(k+\mathrm{d}k)$ 之间的概率 $\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}$，除去常因子不计时，就是 $|g(k)|^2$。更准确地说，如果 (7) 改写为

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\overline{\psi}(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p \tag{18}$$

我们就知道，$\overline{\psi}(p)$ 和 $\psi(x,0)$ 满足贝塞尔-帕塞瓦尔关系式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}|\overline{\psi}(x,0)|^2\mathrm{d}p \tag{19}$$

将这两个积分的值记作 C，那么 $\mathrm{d}\mathscr{P}(x)=\dfrac{1}{C}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x$ 就是在 t=0 时，在 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 之间找到粒子的概率；同样

$$\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p)=\frac{1}{C}|\overline{\psi}(p)|^2\mathrm{d}p \tag{20}$$

就是测量动量得到的结果介于 p 和 $p+\mathrm{d}p$ 之间的概率。

回到式 (17)，我们可以把他写成

$$\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\hbar \tag{21}$$

($\Delta p=\hbar\cdot\Delta k$ 是表示 $|\overline{\psi}(p)|$ 的曲线的宽度)。我们来考虑一个其状态由波包式 (18) 所确定的粒子；我们知道，在 t=0 时这个粒子的位置概率仅在 x_0 附近宽度为 Δx 的区间内才有显著的值，这就意味着，我们知道的位置带有不确定度 Δx。如果我们在同一时刻测量该粒子的动量，则可能得到介于 $p_0+1/2\Delta p$ 与 $p_0-1/2\Delta p$ 之间的一个数值，这是因为在此区间之外，$|\overline{\psi}(p)|^2$ 实际上等于零，于是动量的不确定度 Δp，因而对式 (21) 的解释如下：在任一指定时刻，要以任意高的精准度同时确定粒子的位置和动量是不可能的；当达到 (21) 所规定的下限时，提高位置的精准度就意味着降低动量的精准度，反之亦然。

4 自由波包随时间的演变

我们还是回到一个由一维波包 (6) 描述的自由粒子。

沿 Ox 轴传播的某一平面波 $e^{i(kx-\omega t)}$ 的速度为

$$V_\varphi(k)=\frac{\omega}{k} \tag{22}$$

这是因为平面波只能通过宗量 $(x-\dfrac{\omega}{k}t)$ 而依赖于 x 和 k；$V_\varphi(k)$ 叫做平面波的相速度。带入 (3)

$$V_\varphi(k)=\frac{\hbar k}{2m} \tag{23}$$

我们将会看到，当不同的波具有不同的相速度时，与我们可能预测的相反，波包的极大值位置 x_M 移动的速度并不是平均相速度 $\frac{\omega}{k}=\frac{\hbar k}{2m}$。

回到之前讲的三个波的叠加。对于任意的，$\psi(x,t)$ 应由下式给出

$$\begin{aligned}\psi(x,t)=\frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}&\left\{e^{i[k_0x-\omega_0t]}+\frac{1}{2}e^{i[(k_0-\Delta k/2)x-(\omega_0-\Delta\omega/2)t]}\right.\\&\left.+\frac{1}{2}e^{i[(k_0+\Delta k/2)x-(\omega_0+\Delta\omega/2)t]}\right\}\\=&\frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}e^{i(k_0x-\omega_0t)}\left[1+\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x-\frac{\Delta\omega}{2}t\right)\right]\end{aligned} \tag{24}$$

于是我们看到，$|\psi(x,t)|$ 的极大值在 t=0 时位于 x=0 处。而现在则位于

$$x_M(t)=\frac{\Delta\omega}{\Delta k}t \tag{25}$$

处，而不是在 $x_0=\dfrac{\omega_0}{k_0}t$ 处。这个结果如图 4. 其中 a 表示三个波的实部的三个相邻的极大值 (1),(2),(3) 在 t=0 时的位置；编号 (2) 的三个极大值在 x=0 处重叠，于是在这一点发生相长干涉，这一点就是 $|\psi(x,0)|$ 的极大值的位置。因为相速度随 k 的增大而增大 (式 (23))，所以波数为 $(k_0+\Delta k/2)$ 的那个波的极大值 (3) 将逐渐赶上波数为 (k_0) 的那个波的极大值 (3)，而后者又逐渐赶上波数 $(k_0-\Delta k/2)$ 的那个波的极大值 (3)。到了某个时刻，必须出现图 4b 所示的情况，这时互相重叠的编号为 (3) 的三个极大值，重合点就是 $|\psi(x,t)|$ 的极大值的位置 $x_M(t)$。在图上可以清楚地看到，$x_M(t)$ 并不等于 $\dfrac{\omega_0}{k_0}t$，并且简单计算一下，又可以得出式 (25)。

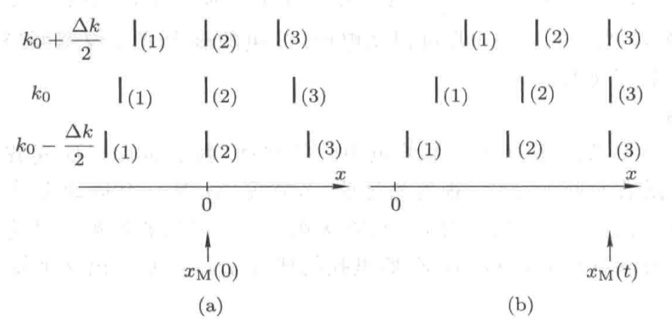

图 4: 三个波的极大值的位置

利用“稳定相位”的方法同样可以求得波包 (6) 的中心的位移。其实，在自由波包的公式 (6) 中，我们就可以看出，要从 $\psi(x,0)$ 过渡到 $\psi(x,t)$，只需将 $g(k)$ 换成 $g(k)e^{-i\omega(k)t}$ 即可，则辐角为

$$\alpha(k)-\omega(k)t \tag{26}$$

由条件 (15) 得到

$$x_M(t)=\left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0}t-\left[\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \tag{27}$$

波包极大值的速度则为

$$V_G(k_0)=\left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \tag{28}$$

$V_G(k_0)$ 叫做波包的群速度。利用色散关系，便可得到

$$V_G(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = 2V_\varphi(k_0) \tag{29}$$

这个式子也适用于对自由粒子的经典描述。

5 一维高斯型波包

5.1 高斯波包的定义

在一维模型中，我们考虑一个自由粒子，他的波函数在 t=0 时的形式为

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{ikx} \mathrm{d}k \tag{30}$$

这个波包可以由很多像 e^{ikx} 这样的平面波叠加而成，各平面波前面的系数是

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} g(k,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \tag{31}$$

这对应于一个中心在 $k = k_0$ 处的高斯函数，因此，我们说 (30) 的波包是高斯型的。

现在介绍一个实用的积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2} \mathrm{d}\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \tag{32}$$

现在来计算 $\psi(x,0)$。为此，将 (30) 的指数中含有 k 的项归并一下，写成下列形式的完全平方

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx = -\frac{a^2}{4}\left[k - k_0 - \frac{2ix}{a^2}\right]^2 + ik_0x - \frac{x^2}{a^2} \tag{33}$$

于是利用 (32) 算出

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-x^2/a^2} \tag{34}$$

于是我们证明了高斯型函数的傅里叶变换还是高斯型函数。

因此，在 t=0 时，粒子的概率密度由下式给出

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi^2}} \cdot e^{-2x^2/a^2} \tag{35}$$

表示 $|\psi(x,0)|^2$ 的曲线就是经典的钟形曲线。波包中心 ($|\psi(x,0)|^2$ 的极大值) 位于 x=0 处。

5.2 不确定度关系式

研究高斯函数 $f(x) = e^{-x^2/b^2}$ 时，为了方便，将他的宽度明确规定为

$$\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}} \tag{36}$$

当 x 从 0 变到 $\pm\Delta x$ 的时候，函数的值缩小为原来的 $1/\sqrt{e}$；这种规定虽然是任意的，但有一个优点，就是他与变量 x 的“方均根偏差”一致。

根据这个规定，可以算出 (35) 中的波包的宽度

$$\Delta x = \frac{a}{2} \tag{37}$$

由于 $|g(k,0)|^2$ 也是一个高斯型函数，可以用同样的方法计算他的宽度 Δk，结果得到

$$\Delta k = \frac{1}{a} \tag{38}$$

或写作

$$\Delta p = \frac{\hbar}{a} \tag{39}$$

从而得到

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{40}$$

这个结果与海森堡不确定性关系完全一致。

5.3 波包的演变

5.3.1 $\psi(x,t)$ 的计算

为了计算 t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$，只需利用 (5)，给出自由粒子的波函数，我们得到

$$\psi(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}e^{i[kx-\omega(k)t]}\mathrm{d}k \tag{41}$$

其中 $\omega(k)=\hbar k^2/2m$。我们将会看到，在 t 时刻，波包仍旧保持为高斯型的。实际上，和前面一样，将指数中含有 k 的项归并一下，组成完全平方后积分，得

$$\psi(x,t)=\left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4}\frac{e^{i\varphi}}{\left(a^4+\dfrac{4\hbar^2t^2}{m^2}\right)^{1/4}}e^{ik_0x}\exp\left\{-\frac{\left[x-\dfrac{\hbar k_0}{m}t\right]^2}{a^2+\dfrac{2i\hbar t}{m}}\right\} \tag{42}$$

其中 φ 是与 x 无关的实数

$$\varphi=-\theta-\frac{\hbar k_0^2}{2m}t \quad and \quad \tan2\theta=\frac{2\hbar t}{ma^2} \tag{43}$$

我们再计算 t 时刻粒子的概率密度 $|\psi(x,t)|^2$，结果为

$$|\psi(x,t)|^2=\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\frac{1}{\sqrt{1+\dfrac{4\hbar^2t^2}{m^2a^4}}}\exp\left\{-\frac{2a^2\left(x-\dfrac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^4+\dfrac{4\hbar^2t^2}{m^2}}\right\} \tag{44}$$

现在证明，波包的模方 $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x$ 与时间无关。由 (41) 可知，$\psi(x,t)$ 的傅里叶变换就是

$$g(k,t)=e^{-i\omega(k)t}g(k,0) \tag{45}$$

显然，$g(k,t)$ 与 $g(k,0)$ 具有相同的模方，贝塞尔-帕塞瓦尔等式表明，正如 $\psi(x,0)$ 和 $g(k,0)$ 具有相同的模方一样，$\psi(x,t)$ 和 $g(k,t)$ 也具有相同的模方。据此便知 $\psi(x,t)$ 和 $\psi(x,0)$ 具有相同的模方。

5.3.2 波包移动的速度

从 (44) 可以看出，概率密度 $|\psi(x,t)|^2$ 也是一个高斯型函数，他的中心在 $x=V_0t$ 处，速度 V_0 由下式给出

$$V_0=\frac{\hbar k_0}{m} \tag{46}$$

5.3.3 波包的扩展

回到式 (44)，根据定义 (36)，波包在 t 时刻的宽度 $\Delta x(t)$ 应为

$$\Delta x(t)=\frac{a}{2}\sqrt{1+\frac{4\hbar^2t^2}{m^2a^4}} \tag{47}$$

由此可见 (图 5)，波包的演变并不只是以速率 V_0 移动，他的形状也在变化。当 t 从 $-\infty$ 增加到 0 时，波包的宽度不断减小，以致在 t=0 时减小到最小；然后宽度随 t 的增大而不断增大 (波包在扩展)。

从 (44) 式还可以看出，波包的高度也在变化，不过与宽度变化的趋势相反，从而使 $\psi(x,t)$ 的模方保持不变。

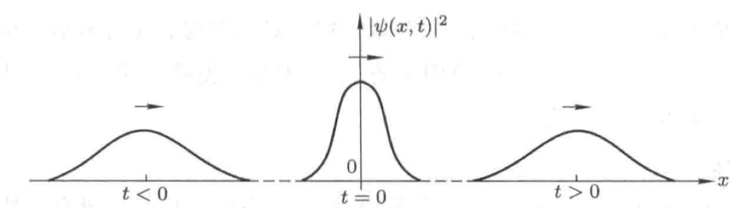

图 5: 波包宽度与高度随时间的变化

函数 $g(k,t)$ 的性质完全不同，因为

$$|g(k,t)|=|g(k,0)| \tag{48}$$

因此，波包的平均动量 $(\hbar k_0)$ 及其动量弥散 $(\hbar\Delta k)$ 都不随时间而变。

由于存在着动量的弥散 $\Delta p=\hbar\Delta k=\hbar/a$，确定粒子的速度就只能精确到 $\Delta v=\Delta p/m=\hbar/ma$。我们设想一群经典粒子，在 t=0 时，他们从 x=0 点出发，速度弥散为 Δv；到了时刻 t，这些粒子的位置的弥散将是 $\delta x_{cl}=\Delta v|t|=\hbar|t|/ma$；这种弥散是随 t 线性增大的，如图 6。在同一图中，

还画出 $\Delta x(t)$ 随时间变化的曲线，当 t 趋向无穷大时，$\Delta x(t)$ 与 δx_{cl} 实际上是重合的。因此我们说，当 t 很大时，可以对宽度 Δx 作出准经典的解释。反之，t 越是接近于 0，$\Delta x(t)$ 的值与 δx_{cl} 的值的差别就越大。实际上，一个量子粒子必须时时满足海森堡不确定原理 $\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \hbar/2$，现在 Δp 是固定的，这个不等式便确定了 Δx 的下限。

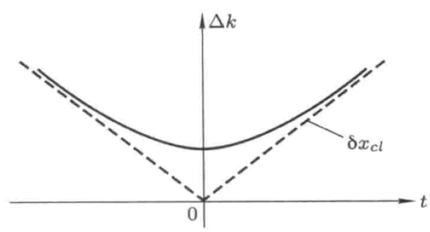

图 6: 图 5 中波包的宽度随时间的变化