

Р. Фейнман

**Фейнмановские лекции по
физике**

Том 9. Квантовая механика

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 53
ББК 22.3
Р11

Р11 **Р. Фейнман**
Фейнмановские лекции по физике: Том 9. Квантовая механика / Р. Фейнман –
М.: Книга по Требованию, 2012. – 254 с.

ISBN 978-5-458-26454-9

ISBN 978-5-458-26454-9

© Издание на русском языке, оформление
«YOYO Media», 2012

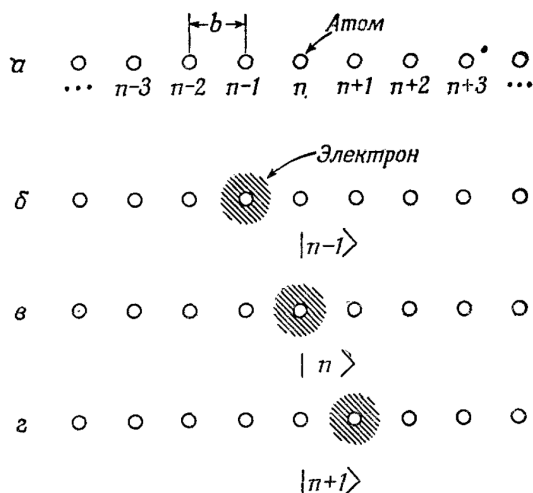
© Издание на русском языке, оцифровка,
«Книга по Требованию», 2012

Эта книга является репринтом оригинала, который мы создали специально для Вас, используя запатентованные технологии производства репринтных книг и печати по требованию.

Сначала мы отсканировали каждую страницу оригинала этой редкой книги на профессиональном оборудовании. Затем с помощью специально разработанных программ мы произвели очистку изображения от пятен, клякс, перегибов и попытались отбелить и выровнять каждую страницу книги. К сожалению, некоторые страницы нельзя вернуть в изначальное состояние, и если их было трудно читать в оригинале, то даже при цифровой реставрации их невозможно улучшить.

Разумеется, автоматизированная программная обработка репринтных книг – не самое лучшее решение для восстановления текста в его первоизданном виде, однако, наша цель – вернуть читателю точную копию книги, которой может быть несколько веков.

Поэтому мы предупреждаем о возможных погрешностях восстановленного репринтного издания. В издании могут отсутствовать одна или несколько страниц текста, могут встретиться невыводимые пятна и кляксы, надписи на полях или подчеркивания в тексте, нечитаемые фрагменты текста или загибы страниц. Покупать или не покупать подобные издания – решать Вам, мы же делаем все возможное, чтобы редкие и ценные книги, еще недавно утраченные и несправедливо забытые, вновь стали доступными для всех читателей.



Ф и г. 11.1. Базисные состояния электрона в одномерной решетке.

с заданной, фиксированной частотой. То же самое происходит с электроном, и по той же причине, потому что электрон описывается в квантовой механике похожими уравнениями.

Но нужно помнить одну вещь: амплитуда для электрона быть в данном месте это *амплитуда*, а не вероятность. Если бы электрон просто просачивался из одного места в другое, как вода через дырочку, то его поведение было бы совсем иным. Если бы, скажем, мы соединили два бачка с водой тоненькой трубкой, по которой вода из одного бачка по капле перетекала в другой, то уровни воды выравнивались бы по экспоненте. С электроном же происходит просачивание амплитуды, а не монотонное переливание вероятностей. А одно из свойств мнимого члена (множителя i в дифференциальных уравнениях квантовой механики) — что он меняет экспоненциальное решение на колебательное. И то, что после этого происходит, ничуть не походит на то, как вода перетекает из одного бачка в другой.

Теперь мы хотим квантовомеханический случай проанализировать количественно. Пусть имеется одномерная система, состоящая из длинной цепи атомов (фиг. 11.1, а). (Кристалл, конечно, трехмерен, но физика в обоих случаях очень близка; если вы разберетесь в одномерном случае, то сможете разобраться и в том, что бывает в трех измерениях.) Мы хотим знать, что случится, если в эту линию атомов поместить отдельный электрон. Конечно, в реальном кристалле таких электронов мириады. Но большинство их (в непроводящем кристалле

почти все) занимает в общей картине движения свое место, каждый вертится вокруг своего атома, и все оказывается совершенно установившимся. А мы хотим рассуждать о том, что будет, если внутри поместить *лишний* электрон. Мы не будем думать о том, что делают прочие электроны, потому что будем считать, что на то, чтобы изменить их энергию, потребуется очень много энергии возбуждения. Мы собираемся добавить электрон и создать как бы новый слабо связанный отрицательный ион. Следя за тем, что поделывает *этот лишний* электрон, мы делаем приближение, пренебрегая при этом внутренним механизмом атомов.

Ясно, что этот электрон сможет перейти к другому атому, переноса в новое место отрицательный ион. Мы предположим, что (в точности, как и в случае электрона, «прыгавшего» от протона к протону) электрон может с какой-то амплитудой «прыгать» от атома к его соседям с любой стороны.

Как же описывать такую систему? Что считать разумными базисными состояниями? Если вы вспомните, что мы делали, когда у электрона было только две возможные позиции, вы сможете догадаться. Пусть в нашей цепочке все расстояния между атомами одинаковы, и пусть мы их пронумеруем по порядку, как на фиг. 11.1,а. Одно базисное состояние — когда электрон находится возле атома № 6; другое базисное состояние — когда электрон находится возле № 7, или возле № 8, и т. д.; n -е базисное состояние можно описать, сказав, что электрон находится возле атома № n . Обозначим это базисное состояние $|n\rangle$. Из фиг. 11.1 ясно, что подразумевается под тремя базисными состояниями:

$$|n-1\rangle, |n\rangle \text{ и } |n+1\rangle.$$

С помощью этих наших базисных состояний можно описать любое состояние $|\varphi\rangle$ нашего одномерного кристалла, задав все амплитуды $\langle n|\varphi\rangle$ того, что состояние $|\varphi\rangle$ находится в одном из базисных состояний, т. е. амплитуду того, что электрон расположен близ данного частного атома. Тогда состояние $|\varphi\rangle$ можно записать в виде суперпозиции базисных состояний:

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\varphi\rangle. \quad (11.1)$$

Кроме того, мы хотим еще предположить, что когда электрон находится близ одного из атомов, то имеется некоторая амплитуда того, что он просочится к тому атому, что слева, или к тому, что справа. Возьмем простейший случай, когда считается, что он может просочиться только к ближайшим соседям, а к следующему соседу он сможет дойти в два приема. Примем, что амплитуды того, что электрон перепрыгнет от одного атома к соседнему, равны $iA/\hbar$ (за единицу времени).

Изменим на время обозначения, и амплитуду $\langle n|\varphi\rangle$, связанную с n -м атомом, обозначим через C_n . Тогда (11.1) будет иметь вид

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle C_n. \quad (11.2)$$

Если бы вы знали каждую из амплитуд C_n в данный момент, то, взяв квадраты их модулей, можно было бы получить вероятность того, что вы увидите электрон, взглянув в этот момент на атом n .

Но что случилось бы чуть позже? По аналогии с изученными нами системами с двумя состояниями мы предлагаем составить гамильтоновы уравнения для этой системы в виде уравнений такого типа:

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = E_0 C_n(t) - A C_{n+1}(t) - A C_{n-1}(t). \quad (11.3)$$

Первый справа коэффициент E_0 физически означает энергию, которую имел бы электрон, если бы он не мог просачиваться от одного атома к другим. (Совершенно неважно, что мы назовем E_0 ; мы неоднократно видели, что реально это не означает ничего, кроме выбора нуля энергии.) Следующий член представляет амплитуду в единицу времени того, что электрон из $(n+1)$ -й ямки просочится в n -ю ямку, а последний член означает амплитуду просачивания из $(n-1)$ -й ямки. Как обычно, A считается постоянным (не зависящим от t).

Для полного описания поведения любого состояния $|\varphi\rangle$ надо для каждой из амплитуд C_n иметь по одному уравнению типа (11.3). Поскольку мы намерены рассмотреть кристалл с очень большим количеством атомов, то допустим, что состояний имеется бесконечно много, атомы тянутся без конца в обе стороны. (При конечном числе атомов придется специально обращать внимание на то, что случается на концах.) А если количество N наших базисных состояний бесконечно велико, то и вся система наших гамильтоновых уравнений бесконечна! Мы напишем только часть ее:

$$\begin{array}{ccc} \vdots & & \vdots \\ i\hbar \frac{dC_{n-1}}{dt} = E_0 C_{n-1} - A C_{n-2} - A C_n, & & \\ i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n - A C_{n-1} - A C_{n+1}, & (11.4) & \\ i\hbar \frac{dC_{n+1}}{dt} = E_0 C_{n+1} - A C_n - A C_{n+2}, & & \\ \vdots & & \vdots \end{array}$$

§ 2. Состояния определенной энергии

Об электроны в решетке мы теперь уже можем узнать очень многое. Для начала попробуем отыскать состояния определенной энергии. Как мы видели в предыдущих главах, это означает, что надо отыскать такой случай, когда все амплитуды меняются с одной частотой, если только они вообще меняются. Мы ищем решение в виде

$$C_n = a_n e^{-iEt/\hbar}. \quad (11.5)$$

Комплексное число a_n говорит нам о том, какова не зависящая от времени часть амплитуды того, что электроны будут обнаружены возле n -го атома. Если это пробное решение подставить для проверки в уравнения (11.4), то получим

$$Ea_n = E_0 a_n - Aa_{n+1} - Aa_{n-1}. \quad (11.6)$$

Перед нами бесконечное число уравнений для бесконечного количества неизвестных a_n ! Ситуация тяжелая!

Но мы знаем, что надо только взять детерминант... нет, погодите! Детерминанты хороши, когда уравнений два, три или четыре. Но здесь их очень много, даже бесконечно много, и вряд ли от детерминантов будет толк. Нет, лучше попробовать решать эти уравнения прямо. Во-первых, пронумеруем *положения* атомов; будем считать, что n -й атом находится в x_n , а $(n+1)$ -й — в x_{n+1} . Если расстояние между атомами равно b (как на фиг. 11.1), то $x_{n+1} = x_n + b$. Взяв начало координат в атоме номер нуль, можно даже получить $x_n = nb$. Уравнение (11.5) можно тогда переписать в виде

$$C_n = a(x_n) e^{-iEt/\hbar}, \quad (11.7)$$

а уравнение (11.6) превратится в

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1}). \quad (11.8)$$

Пользуясь тем, что $x_{n+1} = x_n + b$, это выражение можно также записать в виде

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_n + b) - Aa(x_n - b). \quad (11.9)$$

Это уравнение немного походит на дифференциальное. Оно говорит, что величина $a(x)$ в точке x_n связана с той же физической величиной в соседних точках $x_n \pm b$. (Дифференциальное уравнение связывает значения функции в точке с ее значениями в бесконечно близких точках.) Может быть, здесь подойдут методы, которыми мы обычно пользуемся для решения дифференциальных уравнений? Попробуем.

Решения линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами всегда могут быть выражены через

экспоненты. Попробуем и здесь то же самое; в качестве пробного решения выберем

$$a(x_n) = e^{ikx_n}. \quad (11.10)$$

Тогда (11.9) обратится в

$$Ee^{ikx_n} = E_0 e^{ikx_n} - Ae^{ik(x_n+b)} - Ae^{ik(x_n-b)}. \quad (11.11)$$

Сократим на общий множитель e^{ikx_n} ; получим

$$E = E_0 - Ae^{ikb} - Ae^{-ikb}. \quad (11.12)$$

Два последних члена равняются $2A \cos kb$, так что

$$E = E_0 - 2A \cos kb. \quad (11.13)$$

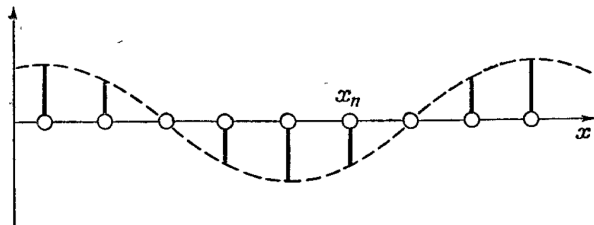
Мы обнаружили, что при *любом* выборе постоянной k имеется решение, энергия которого дается этим уравнением. В зависимости от k получаются различные возможные энергии, и каждая k соответствует отдельному решению. Решений бесконечно много; но это и не удивительно, ведь мы исходим из бесконечного числа базисных состояний.

Посмотрим, каков смысл этих решений. Для каждой k уравнение (11.10) дает свои a . Тогда амплитуды обращаются в

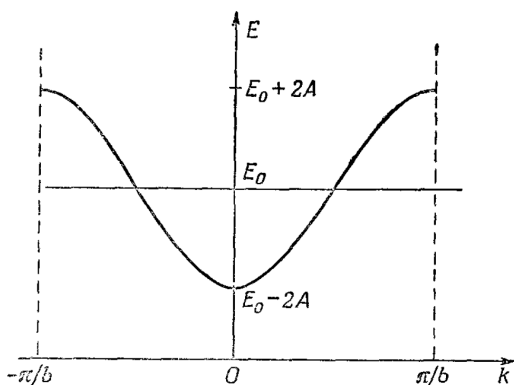
$$C_n = e^{ikx_n} e^{-i(\hbar)Et}, \quad (11.14)$$

причем нужно помнить, что энергия E также зависит от k в согласии с уравнением (11.13). Множитель e^{ikx_n} дает *пространственную зависимость* амплитуд. Амплитуды при переходе от атома к атому колеблются.

При этом имейте в виду, что колебания амплитуды в пространстве *комплексны*, *модуль* ее вблизи любого атома один и тот же, а *фаза* (в данный момент) от атома к атому сдвигается на ikb . Чтобы можно было видеть, что происходит, поставим у каждого атома вертикальную черточку, равную вещественной части амплитуды (фиг. 11.2). Огибающая этих вертикалей (показанная штрихованной линией) является, конечно, косинусоидой. Мнимая часть C_n — это тоже колеблющаяся функция, но



Ф и г . 11.2. Изменение вещественной части C_n с x_n .



Фиг. 11.3. Энергия стационарных состояний как функция параметра k .

она сдвинута по фазе на 90° , так что квадрат модуля (сумма квадратов вещественной и мнимой частей) у всех C один и тот же.

Итак, выбирая k , мы получаем стационарное состояние с определенной энергией E . И в каждом таком состоянии электрону одинаково вероятно оказаться около любого из атомов, никаких преимуществ у одного атома перед другим нет. От атома к атому меняется только фаза. Фазы меняются еще и со временем. Из (11.14) следует, что вещественная и мнимая части распространяются по кристаллу, как волны, как вещественная и мнимая части выражения

$$e^{i[kx_n - (E/\hbar)t]} \quad (11.15)$$

Волна может двигаться либо к положительным, либо к отрицательным x , смотря по тому, какой знак выбран для k .

Заметьте, что мы предположили, что поставленное в нашем пробном решении (11.10) число k есть число вещественное. Теперь видно, почему в бесконечной цепочке атомов так и должно быть. Пусть k было бы мнимым числом $-ik'$. Тогда амплитуды a_n менялись бы, как $e^{k'x_n}$, что означало бы, что амплитуда растет все выше и выше, когда x возрастает, или при k' отрицательном, когда x становится большим отрицательным числом. Такой вид решения был бы вполне хорош, если бы цепочка атомов на чем-то кончалась, но в бесконечной цепи атомов это не может быть физическим решением. Оно привело бы к бесконечным амплитудам и, стало быть, к бесконечным вероятностям, которые не могут отражать действительного положения вещей. Позже мы встретимся с примером, когда и у мнимых k есть смысл.

Соотношение (11.13) между энергией E и волновым числом k изображено на фиг. 11.3. Как следует из этого рисунка, энергия

может меняться от $E_0 - 2A$ при $k = 0$ до $E_0 + 2A$ при $k = \pm\pi/b$. График начерчен для положительных A , при отрицательных A кривую пришлось бы перевернуть, но область изменения осталась бы прежней. Существенно то, что в некоторой области, или «полосе» энергий допустимы любые значения энергии; вне полосы энергии быть не может. Из наших предположений следует, что если электрон в кристалле находится в стационарном состоянии, энергия его не сможет оказаться вне этой полосы.

Согласно (11.10), меньшие k отвечают более низким энергетическим состояниям $E \approx E_0 - 2A$. Когда k по величине растет (все равно, в положительную или отрицательную сторону), то энергия сперва растет, а потом при $k = \pm\pi/b$ достигает максимума, как показано на фиг. 11.3. Для k , больших, чем π/b , энергия опять начала бы убывать. Но такие k рассматривать не стоит, они не приведут к каким-либо новым состояниям, а просто повторяют те состояния, которые уже появлялись при меньших k . Вот как в этом можно убедиться. Рассмотрим состояние наинизшей энергии, для которого $k = 0$. Тогда при всех x_n коэффициент $a(x_n)$ будет один и тот же [см. (11.10)]. Та же самая энергия получилась бы и при $k = 2\pi/b$. Тогда из (11.10) следовало бы

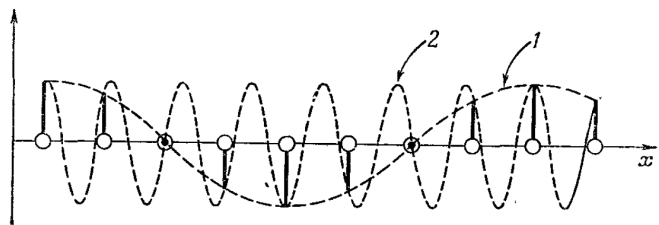
$$a(x_n) = e^{i(2\pi/b)x_n}.$$

Но, считая, что начало координат приходится на x_0 , можно положить $x_n = nb$, и тогда $a(x_n)$ превратится в

$$a(x_n) = e^{i2\pi n} = 1,$$

т. е. состояние, описываемое этими $a(x_n)$, физически ничем не будет отличаться от состояний при $k = 0$. Оно не представляет особого решения.

В качестве другого примера возьмем $k = \pi/4b$. Вещественная часть $a(x_n)$ изображена на фиг. 11.4 кривой 1. Если бы k было в семь раз больше ($k = 7\pi/4b$), то вещественная часть $a(x_n)$ менялась бы так, как показано на кривой 2. (Сама косиноида смысла не имеет, важны только ее значения в точках x_n .)



Фиг. 11.4. Пара значений k , представляющих одну и ту же физическую ситуацию.

Кривая 1 — для $k = \pi/4b$, кривая 2 — для $k = 7\pi/4b$.

Кривые нужны просто для того, чтобы было видно, как все меняется.) Вы видите, что оба значения k во всех x_n дают одинаковые амплитуды.

Вывод из всего этого состоит в том, что все возможные решения нашей задачи получаются, если взять k только из некоторой ограниченной области. Мы выберем область от $-\pi/b$ до $+\pi/b$ (она показана на фиг. 11.3). В этой области энергия стационарных состояний с ростом абсолютной величины k возрастает.

Еще одно побочное замечание о том, с чем было бы забавно повозиться. Представьте, что электрон может не только перепрыгивать к ближайшим соседям с амплитудой $iA/\hbar$, но имеет еще возможность одним махом перепрыгивать и к *следующим за ними* соседям с некоторой другой амплитудой $iB/\hbar$. Вы опять обнаружите, что решение можно искать в форме $a_n = e^{ikx_n}$, этот тип решений является универсальным. Вы также увидите, что стационарные состояния с волновым числом k имеют энергию $E_0 - 2A \cos kb - 2B \cos 2kb$. Это означает, что форма кривой E как функции k не универсальна, а зависит от тех частных допущений, при которых решается задача. Это не обязательно косинусоида, и она даже не обязательно симметрична относительно горизонтальной оси. Но зато всегда верно, что кривая вне интервала $(-\pi/b, \pi/b)$ повторяется, так что заботиться о других значениях k не нужно.

Посмотрим еще внимательнее на то, что происходит при малых k , когда вариации амплитуд между одним x_n и соседним очень маленькие. Будем отсчитывать энергию от такого уровня, чтобы было $E_0 = 2A$; тогда минимум кривой фиг. 11.3 придется на нуль энергии. Для достаточно малых k можно написать

$$\cos kb \approx \frac{1 - k^2 b^2}{2},$$

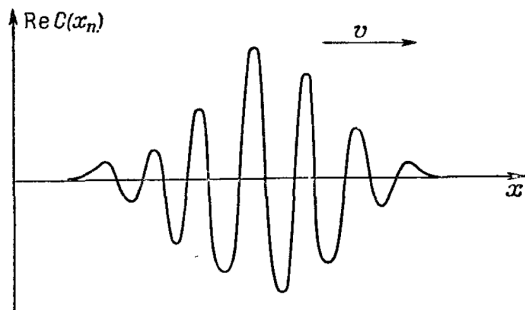
и энергия (11.13) превратится в

$$E = Ak^2 b^2. \quad (11.16)$$

Получается, что энергия состояния пропорциональна квадрату волнового числа, описывающего пространственные вариации амплитуд C_n .

§ 3. Состояния, зависящие от времени

В этом параграфе мы хотим подробнее обсудить поведение состояний в одномерной решетке. Если для электрона амплитуда того, что он окажется в x_n , равна C_n , то вероятность найти его там будет $|C_n|^2$. Для *стационарных* состояний, описанных уравнением (11.12), эта вероятность при всех x_n одна и та же и со временем не меняется. Как же отобразить такое положение вещей, которое грубо можно было бы описать, сказав, что электрон опреде-



Ф и г. 11.5. Вещественная часть $C(x_n)$ как функция x для суперпозиции нескольких состояний с близкими энергиями.

ленной энергии сосредоточен в определенной области, так что более вероятно найти его в каком-то одном месте, чем в другом? Этого можно добиться суперпозицией нескольких решений, похожих на (11.12), но со слегка различными значениями k и, следовательно, с различными энергиями. Тогда, по крайней мере при $t = 0$, амплитуда C_n вследствие интерференции различных слагаемых будет зависеть от местоположения, в точности так же, как получаются биения, когда имеется смесь волн разной длины [см. гл. 48 (вып. 4)]. Значит, можно составить такой «волновой пакет», что в нем будет преобладать волновое число k_0 , но будут присутствовать и другие волновые числа, близкие к k_0^* .

В нашей суперпозиции стационарных состояний амплитуды с разными k будут представлять состояния со слегка различными энергиями и, стало быть, со слегка различными частотами; интерференционная картина суммарного C_n поэтому тоже будет меняться во времени, возникнет картина «биений». Как мы видели в гл. 48 (вып. 4), пики биений [места, где $|C(x_n)|^2$ наибольшие] с течением времени начнут двигаться по x ; скорость их движения мы назвали «групповой». Мы нашли, что эта групповая скорость связана с зависимостью k от частоты формулой

$$v_{\text{групп}} = \frac{d\omega}{dk}; \quad (11.17)$$

все это в равной мере относится и к нашему случаю. Состояние электрона, имеющее вид «скопления», т. е. состояние, для которого C_n меняется в пространстве так, как у волнового пакета на фиг. 11.5, будет двигаться вдоль нашего одномерного

* Только не старайтесь сделать пакет чересчур узким.

«кристалла» с быстротой v , равной $d\omega/dk$, где $\omega = E/\hbar$. Подставляя (11.16) вместо E , получаем

$$v = \frac{2Ab^2}{\hbar} k. \quad (11.18)$$

Иными словами, электроны движутся по кристаллу с быстротой, пропорциональной самому характерному k . Тогда, согласно (11.16), энергия такого электрона пропорциональна квадрату его скорости, *он ведет себя подобно классической частице*. Пока мы рассматриваем все в столь крупном масштабе, что никаких тонкостей строения разглядеть не можем, наша квантовомеханическая картина приводит к тем же результатам, что и классическая физика.

В самом деле, если из (11.18) найти k и подставить его в (11.16), то получится

$$E = \frac{1}{2} m_{\text{эфф}} v^2, \quad (11.19)$$

где $m_{\text{эфф}}$ — постоянная. Избыточная «энергия движения» электрона в пакете зависит от скорости в точности так же, как и у классической частицы. Постоянная $m_{\text{эфф}}$, именуемая «эффективной массой», дается выражением

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \quad (11.20)$$

Заметьте еще, что можно написать

$$m_{\text{эфф}} v = \hbar k. \quad (11.21)$$

Если мы решим назвать $m_{\text{эфф}} v$ «импульсом», то этот импульс будет связан с волновым числом k так же, как и у свободной частицы.

Не забывайте, что $m_{\text{эфф}}$ ничего общего не имеет с реальной массой электрона. Она может быть совсем другой, хотя следует сказать, что в реальных кристаллах часто случается, что ее порядок величины оказывается примерно таким же (в 2 или, скажем, в 20 раз больше, чем масса электрона в пустом пространстве).

Мы только что с вами раскрыли поразительную тайну — как это электрон в кристалле (например, пущенный в германий добавочный электрон) может пронестись через весь кристалл, может лететь по нему совершенно свободно, даже если ему приходится сталкиваться со всеми атомами. Это получается оттого, что его амплитуды, перетекая с одного атома на другой, прокладывают ему путь через кристалл. Вот отчего твердое тело может проводить электричество.