

Дрогобицький державний педагогічний університет  
імені Івана Франка

кафедра фізики та інформаційних систем

**Роман ЛЕШКО**

**ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА**  
**Практикум з квантової механіки**

Дрогобич  
2026

УДК 530.145(075.8)

ББК В31я73

**Лешко Р.** Теоретична фізика. Практикум з квантової механіки. Дрогобич : ДДПУ ім. І. Франка, 2026. 65 с.

Навчальний посібник «Теоретична фізика. Практикум з квантової механіки» написаний відповідно до робочої програми навчальної дисципліни «Теоретична фізика» для підготовки фахівців бакалаврського рівня вищої освіти спеціальності 014 Середня освіта (Фізика, Інформатика), затвердженої Вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

У посібнику подано приклади розв'язання задач з різних тем квантової механіки. Для посібника характерне стисле викладення теоретичних відомостей з акцентом на основних положеннях та детальні розв'язки задач.

Бібліографія: 13 назв.

#### **Рецензенти:**

- доцент кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, кандидат фізико-математичних наук Олеся ДАНЬКІВ;
- доцент кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, кандидат фізико-математичних наук Олег КУЗИК.

**Відповідальний за випуск:** Роман ЛЕШКО, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Рекомендовано до друку Вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка як навчальний посібник (протокол № 5 від 23.04.2026 р.)

# Зміст

Передмова . . . . .	4
Тема 1. Основи квантової механіки . . . . .	5
Тема 2. Математичний апарат квантової механіки . . . . .	11
Тема 3. Рівняння Шредінгера і закон збереження ймовірності .	20
Тема 4. Найпростіші задачі квантової механіки . . . . .	28
Тема 5. Момент кількості руху і спін . . . . .	41
Тема 6. Квантові стани в центральній-симетричному полі . . . .	48
Тема 7. Теорія збурень . . . . .	57
Задачі та завдання для самостійного розв'язання . . . . .	62
Список використаних джерел . . . . .	65

## Передмова

Пропонований навчальний посібник «ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА. Практикум з квантової механіки» присвячений практичному опануванню основ квантової механіки — однієї з найфундаментальніших і найпарадоксальніших теорій сучасної фізики. Він є логічним продовженням лекційного курсу і орієнтований на формування вмінь самостійно розв'язувати задачі, аналізувати фізичний зміст результатів та візуалізувати квантові явища.

Структура практикуму поєднує стислі теоретичні відомості (ключові формули, постулати, фізична інтерпретація) з детально розв'язаними прикладами задач різної складності — від нормування хвильової функції та принципу суперпозиції до тунельного ефекту, атома водню, теорії збурень, ефектів Зеемана та Штарка. Кожна тема супроводжується графічними ілюстраціями, що дозволяє наочно продемонструвати інтерференцію, тунелювання, прецесію спіну та інші квантові процеси.

Особлива увага приділена методичній чіткості розв'язків: кожен приклад містить чітке формулювання умови, покрокове обґрунтування, математичні перетворення, фізичний аналіз результату та відповідь. Це дає можливість студентам не лише засвоїти теорію, а й виробити практичні навички застосування операторів, рівняння Шредингера, теорії збурень та інших інструментів квантової механіки.

Посібник розрахований на студентів фізико-математичних спеціальностей вищих навчальних закладів, які вивчають квантову механіку в рамках курсу «Теоретична фізика». Він буде корисним як при підготовці до практичних занять і контрольних робіт, так і для самостійної роботи та поглибленого вивчення предмета.

Бажаємо читачам успіхів у опануванні квантової механіки! Нехай цей практикум допоможе Вам не лише успішно скласти іспит, а й по-справжньому відчувати красу та логіку мікросвіту.

*Роман ЛЕШКО*

# Тема 1. Основи квантової механіки

## Короткі теоретичні відомості та формули

### Хвильова функція та ймовірнісний опис

У класичній механіці стан частинки повністю визначається координатами та імпульсом, які детерміновано змінюються згідно з другим законом Ньютона:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F} \left( \vec{r}, \frac{d\vec{r}}{dt}, t \right)$$

У квантовій механіці поняття траєкторії втрачає зміст, і стан мікрочастинки описується комплексною хвильовою функцією простору і часу  $\Psi(\vec{r}, t)$ .

Сама хвильова функція фізичного змісту не має, але квадрат її модуля  $w(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$  визначає густину ймовірності знаходження частинки в заданій точці.

Ймовірність  $P(V, t)$  виявити частинку в певному скінченному об'ємі  $V$  обчислюється шляхом інтегрування густини ймовірності:

$$P(V, t) = \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$$

### Умови регулярності та нормування

Щоб хвильова функція мала фізичний сенс, вона повинна задовольняти умови регулярності: бути скінченною (квадратично інтегрованою), неперервною (разом зі своїми першими похідними) та однозначною в усьому просторі.

Оскільки частинка достовірно перебуває десь у нескінченному просторі, повна ймовірність має дорівнювати одиниці. Це математично виражається умовою нормування:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

Якщо хвильова функція  $\Phi$  задовольняє умови регулярності, але не є нормованою, її множать на нормувальну константу  $A$ , яку знаходять за формулою:

$$A = \frac{1}{\sqrt{\int |\Phi|^2 dV}}$$

### Принцип суперпозиції

Якщо квантова система може перебувати у стані  $\Psi_1$  та у стані  $\Psi_2$ , то вона також може перебувати у стані  $\Psi$ , який є їхньою лінійною комбінацією:  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , де  $c_1$  та  $c_2$  — комплексні числа.

Густина ймовірності для суперпозиції двох станів містить інтерференційний доданок:

$$w = |c_1|^2 w_1 + |c_2|^2 w_2 + 2 \operatorname{Re}(c_1^* c_2 \Psi_1^* \Psi_2)$$

Цей доданок відповідає за перерозподіл імовірності (підсилення або послаблення).

## Приклади розв'язаних задач

### Задача 1. Нормування хвильової функції

Хвильова функція частинки, що здійснює одновимірний рух, задана у вигляді  $\Psi(x) = Ae^{-\alpha|x|}$ , де  $\alpha > 0$  — відомий параметр. Знайти нормувальну константу  $A$ .

*Розв'язання:*

Використаємо умову нормування для одновимірного випадку:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Підставимо задану функцію:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-2\alpha|x|} dx = 1$$

Оскільки підінтегральна функція є парною (залежить від модуля  $x$ ), інтеграл по всій осі дорівнює подвоєному інтегралу від нуля до нескінченності:

$$2|A|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx = 1$$

Обчислимо цей інтеграл:

$$\int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx = \left( -\frac{1}{2\alpha} e^{-2\alpha x} \right) \Big|_0^{+\infty} = -\frac{1}{2\alpha} (0 - 1) = \frac{1}{2\alpha}$$

Підставимо отримане значення в початкове рівняння:

$$2|A|^2 \left( \frac{1}{2\alpha} \right) = 1 \implies \frac{|A|^2}{\alpha} = 1 \implies |A|^2 = \alpha$$

Звідси  $A = \sqrt{\alpha}$  (зазвичай обирають дійсне додатне значення фази).

**Відповідь:**  $A = \sqrt{\alpha}$ .

### Задача 2. Обчислення ймовірності

Частинка знаходиться у стані з нормованою хвильовою функцією  $\Psi(x) = \sqrt{\alpha}e^{-\alpha|x|}$ . Визначити ймовірність того, що в результаті вимірювання координати частинку буде виявлено в інтервалі  $x \in \left[-\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right]$ .

*Розв'язання:*

Ймовірність знаходження частинки в заданому інтервалі обчислюється як інтеграл від густини ймовірності:

$$P = \int_{-1/\alpha}^{1/\alpha} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-1/\alpha}^{1/\alpha} \alpha e^{-2\alpha|x|} dx$$

Знову скористаємося властивістю парності функції:

$$P = 2\alpha \int_0^{1/\alpha} e^{-2\alpha x} dx$$

Беремо інтеграл:

$$P = 2\alpha \left( -\frac{1}{2\alpha} e^{-2\alpha x} \right) \Big|_0^{1/\alpha} = - \left( e^{-2\alpha \cdot \frac{1}{\alpha}} - e^0 \right) = -(e^{-2} - 1) = 1 - e^{-2}$$

Оскільки  $e \approx 2.718$ , то  $e^{-2} \approx 0.135$ . Отже,  $P \approx 1 - 0.135 = 0.865$ , тобто ймовірність становить 86.5%.

**Відповідь:**  $P = 1 - e^{-2} \approx 0.865$ .

### Задача 3. Застосування принципу суперпозиції

Квантова система може перебувати у двох взаємно ортогональних нормованих станах  $\Psi_1$  та  $\Psi_2$ . Відомо, що система знаходиться у стані суперпозиції  $\Psi = \frac{1}{2}\Psi_1 + c_2\Psi_2$ . Визначити модуль константи  $c_2$ , за умови, що загальний стан  $\Psi$  також є нормованим.

*Розв'язання:*

Запишемо умову нормування для стану суперпозиції  $\Psi$ :

$$\int |\Psi|^2 dV = 1$$

$$\int \left( \frac{1}{2}\Psi_1^* + c_2^*\Psi_2^* \right) \left( \frac{1}{2}\Psi_1 + c_2\Psi_2 \right) dV = 1$$

Розкриваємо дужки та розбиваємо на окремі інтеграли:

$$\frac{1}{4} \int |\Psi_1|^2 dV + |c_2|^2 \int |\Psi_2|^2 dV + \frac{1}{2}c_2 \int \Psi_1^*\Psi_2 dV + \frac{1}{2}c_2^* \int \Psi_2^*\Psi_1 dV = 1$$

Згідно з умовою задачі:

1. Стани нормовані, отже:  $\int |\Psi_1|^2 dV = 1$  та  $\int |\Psi_2|^2 dV = 1$ .
2. Стани ортогональні, тому їхні інтеграли перекриття дорівнюють нулю:  $\int \Psi_1^*\Psi_2 dV = 0$  та  $\int \Psi_2^*\Psi_1 dV = 0$ .

Підставляємо ці значення у розгорнуте рівняння:

$$\frac{1}{4}(1) + |c_2|^2(1) + 0 + 0 = 1$$

$$|c_2|^2 = 1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4}$$

Звідси знаходимо модуль константи:

$$|c_2| = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

**Відповідь:**  $|c_2| = \frac{\sqrt{3}}{2}$ .

#### Задача 4. Статистичне тлумачення та нормування

Хвильова функція частинки задана у вигляді  $\Psi(x) = Ce^{-\frac{x^2}{2a^2}}$ , де  $a > 0$  — відомий параметр, а  $C$  — константа нормування. Визначити константу  $C$  та записати нормовану хвильову функцію.

*Розв'язання:*

Згідно зі статистичним тлумаченням (постулатом Борна), квадрат модуля хвильової функції  $|\Psi(x)|^2$  визначає густину ймовірності. Умова нормування вимагає, щоб повна ймовірність знайти частинку в усьому просторі дорівнювала одиниці:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Підставимо задану функцію:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = 1$$

Використаємо відомий табличний інтеграл Пуассона  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ . У нашому випадку  $\alpha = \frac{1}{a^2}$ , тому:

$$C^2 \sqrt{\pi a^2} = 1 \implies C^2 a \sqrt{\pi} = 1 \implies C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

Отже, нормована хвильова функція має вигляд:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

**Відповідь:**  $C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$ .

### Задача 5. Принцип суперпозиції

Квантова система може перебувати у станах, що описуються взаємно ортогональними та нормованими хвильовими функціями  $\Psi_1$  та  $\Psi_2$ . Система перебуває у стані суперпозиції:

$$\Psi = \frac{1}{2}\Psi_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\alpha}\Psi_2$$

де  $\alpha$  — деяка дійсна фаза. Перевірити, чи нормована загальна функція  $\Psi$ , та визначити ймовірності  $P_1$  і  $P_2$  виявити систему у станах 1 та 2 відповідно.

*Розв'язання:*

За принципом суперпозиції, хвильова функція подається як лінійна комбінація базових станів:  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ . Ймовірність виявити систему в  $i$ -му стані дорівнює квадрату модуля відповідного коефіцієнта:  $P_i = |c_i|^2$ . Знайдемо ці ймовірності для заданого стану:

$$P_1 = |c_1|^2 = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}$$

$$P_2 = |c_2|^2 = \left|\frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\alpha}\right|^2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 |e^{i\alpha}|^2 = \frac{3}{4} \cdot 1 = \frac{3}{4}$$

Перевіримо умову нормування загального стану (сума ймовірностей має дорівнювати одиниці):

$$P_1 + P_2 = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} = 1$$

Умова виконується, отже, функція  $\Psi$  нормована правильно. Наявність фазового множника  $e^{i\alpha}$  не впливає на ймовірності виявлення самих станів.

**Відповідь:** Функція нормована;  $P_1 = 0.25$ ,  $P_2 = 0.75$ .

### Задача 6. Середні значення фізичних величин

Стан частинки описується нормованою хвильовою функцією  $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$  на інтервалі  $x \in [0, L]$  (поза інтервалом  $\Psi = 0$ ). Знайти середнє значення координати  $\langle x \rangle$  та середнє значення квадрата координати  $\langle x^2 \rangle$ .

*Розв'язання:*

Середнє значення функції від координати  $f(x)$  у квантовій механіці обчислюється за формулою:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\Psi(x)|^2 dx$$

Оскільки функція відмінна від нуля лише на відрізку  $[0, L]$ , межі інтегрування звужуються. Знайдемо  $\langle x \rangle$ :

$$\langle x \rangle = \int_0^L x \left( \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \right)^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx$$

Використаємо формулу  $\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos(2\alpha)}{2}$ :

$$\langle x \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L x \left( 1 - \cos \frac{2\pi x}{L} \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x dx - \frac{1}{L} \int_0^L x \cos \frac{2\pi x}{L} dx$$

Перший інтеграл дає  $\frac{L^2}{2}$ . Другий інтеграл дорівнює нулю (оскільки інтегрується повний період). Отже:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{L} \cdot \frac{L^2}{2} = \frac{L}{2}$$

Тепер знайдемо  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x^2 \left( 1 - \cos \frac{2\pi x}{L} \right) dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L x^2 dx - \frac{1}{L} \int_0^L x^2 \cos \left( \frac{2\pi x}{L} \right) dx$$

Перший інтеграл:  $\frac{1}{L} \left[ \frac{x^3}{3} \right]_0^L = \frac{L^2}{3}$ . Другий інтеграл береться частинами і дорівнює  $-\frac{L^2}{2\pi^2}$ . Тоді результат:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2} = L^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

**Відповідь:**  $\langle x \rangle = \frac{L}{2}$ ,  $\langle x^2 \rangle = L^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$ .

## Тема 2. Математичний апарат квантової механіки

### Короткі теоретичні відомості та формули

#### Оператори фізичних величин

- У квантовій механіці кожній фізичній величині  $A$  (координаті, імпульсу, енергії тощо) ставиться у відповідність певний математичний об'єкт — лінійний оператор  $\hat{A}$ . Оператор вказує на правило, за яким одна функція перетворюється на іншу:  $\hat{A}\Psi = \Phi$ .
- *Основні оператори:*
  - Оператор координати:  $\hat{x} = x$  (зводиться до множення на координату).
  - Оператор проекції імпульсу:  $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ .
  - Оператор кінетичної енергії:  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ , де  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  — оператор Лапласа.
  - Оператор повної енергії (гамільтоніан):  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)$ , де  $U(x, y, z)$  — потенціальна енергія взаємодії.
- *Комутатор операторів:* Величина  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ . Якщо комутатор дорівнює нулю ( $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ), кажуть, що оператори комутують. Фізично це означає, що відповідні фізичні величини можна виміряти одночасно з довільною точністю.

#### Власні значення та власні функції ермітових операторів

- Якщо дія оператора на функцію зводиться до множення цієї функції на деяке число  $a$ , тобто виконується рівність:

$$\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$$

то таке рівняння називається *рівнянням на власні значення*. Число  $a_n$  називається власним значенням, а функція  $\Psi_n$  — власною функцією оператора  $\hat{A}$ .

- Фізичний зміст: якщо система перебуває у стані, що описується власною функцією  $\Psi_n$  оператора  $\hat{A}$ , то вимірювання фізичної величини  $A$  достовірно дасть значення  $a_n$ .
- Оператори фізичних величин мають бути *ермітовими* (самоспряженими). Це гарантує, що їхні власні значення завжди є дійсними числами (адже результати вимірювань не можуть бути комплексними).

## Співвідношення невизначеностей

- Якщо два оператори не комутують, відповідні фізичні величини не можуть мати одночасно точних значень. Найвідомішим прикладом є координата та проекція імпульсу:  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0$ .
- Математично це виражається співвідношенням невизначеностей Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

де  $\Delta x$  та  $\Delta p_x$  — середньоквадратичні відхилення координати та імпульсу.

- Аналогічне співвідношення існує для енергії та часу життя стану:  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ .

## Приклади розв'язаних задач

### Задача 1. Обчислення комутатора

Знайти комутатор оператора координати  $\hat{x}$  та оператора проекції імпульсу  $\hat{p}_x$ .

*Розв'язання:*

За означенням, комутатор двох операторів  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$ . Щоб знайти результат дії комутатора, подіємо ним на довільну хвильову функцію  $\Psi(x)$ :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi = (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\Psi = \hat{x}(\hat{p}_x\Psi) - \hat{p}_x(\hat{x}\Psi)$$

Підставимо явний вигляд операторів ( $\hat{x} = x$ ,  $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ ):

$$\hat{x}(\hat{p}_x\Psi) = x \left( -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

У другому доданку оператор імпульсу діє на добуток  $x\Psi$ , тому застосовуємо правило диференціювання добутку:

$$\hat{p}_x(\hat{x}\Psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -i\hbar \left( \frac{\partial x}{\partial x}\Psi + x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \left( \Psi + x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \right)$$

Підставимо знайдені вирази у початкове рівняння:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi = -i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x} - \left( -i\hbar\Psi - i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\Psi + i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

Скорочуючи однакові доданки з протилежними знаками, отримуємо:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi = i\hbar\Psi$$

Оскільки функція  $\Psi$  є довільною, можемо записати операторну тотожність:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

**Відповідь:**  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ . Це базове комутаційне співвідношення, з якого випливає принцип невизначеності.

### Задача 2. Власні функції та власні значення

Перевірити, чи є функція  $\Psi(x) = Ae^{ikx}$  (де  $k$  — дійсна стала) власною функцією оператора проекції імпульсу  $\hat{p}_x$  та оператора кінетичної енергії  $\hat{T}$ . Якщо так, знайти відповідні власні значення.

*Розв'язання:*

1. Перевіримо для оператора імпульсу  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ . Подіємо цим оператором на функцію:

$$\hat{p}_x \Psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} (Ae^{ikx}) = -i\hbar \cdot A \cdot (ik)e^{ikx} = -i^2 \hbar k \cdot Ae^{ikx}$$

Оскільки  $i^2 = -1$ , маємо:

$$\hat{p}_x \Psi(x) = \hbar k \cdot \Psi(x)$$

Отриманий вираз має вигляд  $\hat{A}\Psi = a\Psi$ . Отже, задана функція є власною функцією оператора імпульсу, а відповідне власне значення дорівнює  $p_x = \hbar k$ .

2. Перевіримо для оператора кінетичної енергії  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ .

$$\hat{T}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (Ae^{ikx})$$

Знайдемо другу похідну:

$$\frac{d^2}{dx^2} (Ae^{ikx}) = \frac{d}{dx} (A(ik)e^{ikx}) = A(ik)^2 e^{ikx} = -Ak^2 e^{ikx} = -k^2 \Psi(x)$$

Підставимо у вираз для дії оператора:

$$\hat{T}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 \Psi(x)) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x)$$

Функція також є власною функцією оператора кінетичної енергії, а власне значення дорівнює  $T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}$ , що повністю відповідає класичній формулі.

**Відповідь:** Функція є власною для обох операторів; власні значення:  $p_x = \hbar k$ ,  $T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

### Задача 3. Співвідношення невизначеностей

Електрон локалізований у межах атома лінійного розміру  $a \approx 10^{-10}$  м. Оцінити мінімальну кінетичну енергію електрона, користуючись співвідношенням

невизначеностей Гейзенберга. (Маса електрона  $m \approx 9.1 \cdot 10^{-31}$  кг, стала Планка  $\hbar \approx 1.05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с).

*Розв'язання:*

Оскільки електрон знаходиться в межах атома, невизначеність його координати можна прийняти рівною розміру атома:  $\Delta x \approx a$ . За співвідношенням невизначеностей, невизначеність імпульсу становить:

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \approx \frac{\hbar}{2a}$$

Мінімальне значення самого імпульсу  $p$  за порядком величини не може бути меншим за його невизначеність  $\Delta p_x$  (інакше електрон міг би мати нульовий імпульс і точну координату, що заборонено). Отже,  $p_{min} \approx \Delta p_x = \frac{\hbar}{2a}$ . Тоді мінімальна кінетична енергія електрона:

$$E_{min} = \frac{p_{min}^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

Підставимо числові значення:

$$E_{min} \approx \frac{(1.05 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-10})^2} = \frac{1.1 \cdot 10^{-68}}{72.8 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} \approx \frac{1.1 \cdot 10^{-68}}{7.28 \cdot 10^{-50}} \approx 1.5 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

Переведемо отримане значення в електрон-вольти ( $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ):

$$E_{min} \approx \frac{1.5 \cdot 10^{-19}}{1.6 \cdot 10^{-19}} \approx 0.94 \text{ eV}$$

Цей результат (порядку 1 eV) добре узгоджується з типовими енергіями валентних електронів у реальних атомах, підтверджуючи працездатність принципу Гейзенберга для оцінок.

**Відповідь:**  $E_{min} \approx 0.94 \text{ eV}$ .

#### Задача 4. Комутатор координати та квадрата імпульсу

Знайти комутатор оператора координати  $\hat{x}$  та квадрата оператора проекції імпульсу  $\hat{p}_x^2$ .

*Розв'язання:*

За означенням, комутатор має вигляд  $[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = \hat{x}\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2\hat{x}$ . Оператор квадрата імпульсу дорівнює  $\hat{p}_x^2 = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ . Подіємо комутатором на довільну хвильову функцію  $\Psi(x)$ :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2]\Psi = \hat{x}(\hat{p}_x^2\Psi) - \hat{p}_x^2(\hat{x}\Psi)$$

Знайдемо дію кожного з доданків окремо. Перший доданок:

$$\hat{x}(\hat{p}_x^2\Psi) = x \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = -\hbar^2 x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Для другого доданку потрібно двічі продиференціювати добуток  $x\Psi$ :

$$\hat{p}_x^2(\hat{x}\Psi) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi) = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -\hbar^2 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = -\hbar^2 \left( 2 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right)$$

Підставимо отримані вирази у вихідне рівняння:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2]\Psi = -\hbar^2 x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \left[ -\hbar^2 \left( 2 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \right]$$

Після розкриття дужок доданки з другою похідною скорочуються:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2]\Psi = 2\hbar^2 \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Цей вираз можна переписати через оператор імпульсу  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . Оскільки  $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x$ , то:

$$2\hbar^2 \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 2\hbar^2 \left( \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \Psi \right) = 2i\hbar \hat{p}_x \Psi$$

Відкидаючи довільну функцію  $\Psi$ , отримуємо операторну тотожність:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = 2i\hbar \hat{p}_x$$

*Примітка:* Цей же результат можна отримати швидше, скориставшись властивістю комутаторів  $[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}]$ .

**Відповідь:**  $[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = 2i\hbar \hat{p}_x$ .

### Задача 5. Власні функції та власні значення оператора моменту імпульсу

Знайти нормовані власні функції та власні значення оператора проекції моменту імпульсу на вісь  $z$ , який у полярних координатах має вигляд  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$ , де кут  $\varphi \in [0, 2\pi]$ .

*Розв'язання:*

Запишемо рівняння на власні значення для оператора  $\hat{L}_z$ :

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi)$$

де  $\Phi(\varphi)$  — шукана власна функція, а  $L_z$  — власне значення (дійсне число). Підставимо явний вигляд оператора:

$$-i\hbar \frac{d\Phi}{d\varphi} = L_z \Phi$$

Розділимо змінні:

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = i \frac{L_z}{\hbar} d\varphi$$

Інтегруючи обидві частини, отримуємо загальний розв'язок диференціального рівняння:

$$\ln \Phi = i \frac{L_z}{\hbar} \varphi + \ln C \implies \Phi(\varphi) = C e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$$

Згідно з умовами регулярності, хвильова функція має бути однозначною. Оскільки кути  $\varphi$  та  $\varphi + 2\pi$  відповідають одній і тій самій точці простору, функція повинна бути періодичною з періодом  $2\pi$ :

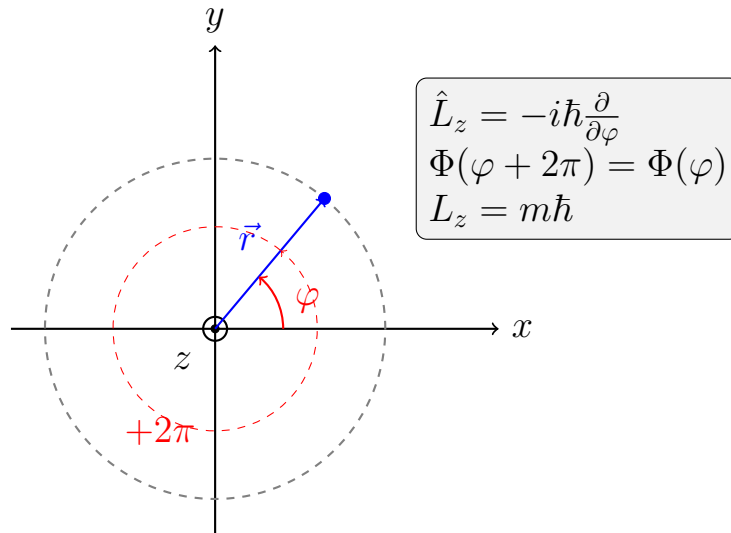


Рис. 2.1. Азимутальний кут  $\varphi$  та періодичність хвильової функції

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

$$C e^{i \frac{L_z}{\hbar} (\varphi + 2\pi)} = C e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi} \implies e^{i \frac{L_z}{\hbar} 2\pi} = 1$$

З формули Ейлера випливає, що  $e^{i2\pi m} = 1$ , де  $m$  — ціле число ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Отже:

$$\frac{L_z}{\hbar} 2\pi = 2\pi m \implies L_z = m\hbar$$

Ми знайшли спектр власних значень — проекція моменту імпульсу є квантованою величиною. Тепер знайдемо константу  $C$  з умови нормування  $\int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = 1$ :

$$\int_0^{2\pi} |C|^2 |e^{im\varphi}|^2 d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} 1 \cdot d\varphi = |C|^2 \cdot 2\pi = 1 \implies C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

**Відповідь:** Власні значення  $L_z = m\hbar$  ( $m = 0, \pm 1, \dots$ ); власні функції  $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ .

### Задача 6. Оцінка енергії нульових коливань осцилятора

Користуючись співвідношенням невизначеностей Гейзенберга, оцінити мінімальну можливу енергію (енергію нульових коливань) лінійного гармонічного осцилятора масою  $m$  із власною частотою  $\omega$ .

*Розв'язання:*

Класичний вираз для повної енергії гармонічного осцилятора:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

У квантовій механіці частинка не може перебувати у стані спокою на дні потенціальної ями ( $x = 0, p = 0$ ), оскільки це порушує принцип невизначеності. Нехай частинка локалізована в області розміром  $x$  навколо положення рівноваги. Тоді невизначеність координати  $\Delta x \sim x$ . Відповідна невизначеність імпульсу становить  $\Delta p \sim p$ . Зі співвідношення невизначеностей  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  візьмемо мінімально можливе значення імпульсу:

$$p \approx \frac{\hbar}{2x}$$

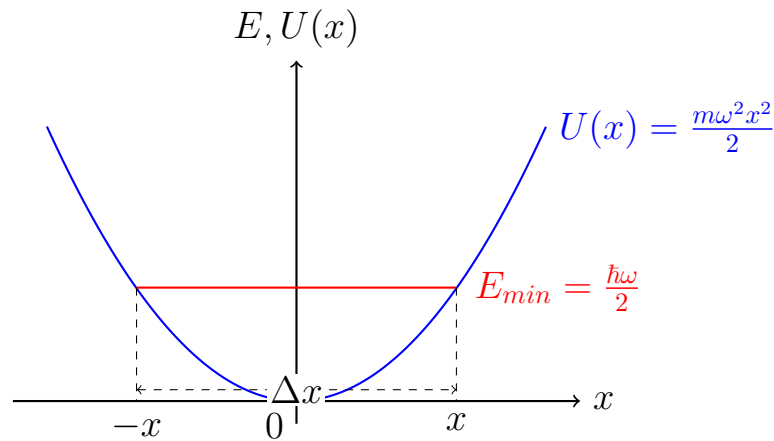


Рис. 2.2. Енергія нульових коливань гармонічного осцилятора

Підставимо цей вираз у формулу для енергії. Тепер енергія є функцією лише одного параметра — розміру області локалізації  $x$ :

$$E(x) = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2x} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Щоб знайти мінімум енергії, візьмемо похідну по  $x$  і прирівняємо її до нуля:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{\hbar^2}{4mx^3} + m\omega^2 x = 0$$

$$m\omega^2 x = \frac{\hbar^2}{4mx^3} \implies x^4 = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \implies x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Підставимо знайдене значення  $x^2$  назад у вираз для енергії:

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{8m \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)} + \frac{m\omega^2 \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)}{2} = \frac{\hbar^2 \cdot 2m\omega}{8m\hbar} + \frac{m\omega^2 \hbar}{4m\omega} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Отриманий результат точно збігається зі строгим розв'язком рівняння Шре-дінгера для основного стану квантового гармонічного осцилятора.

**Відповідь:**  $E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}$ .

### Задача 7. Застосування співвідношення невизначеностей до дифракції мікрочастинок

Пучок електронів із заданим початковим імпульсом  $p$  падає перпендикулярно на непрозорий екран, у якому прорізна вузька щілина шириною  $a$ . Використовуючи співвідношення невизначеностей Гейзенберга, оцінити кутову розбіжність пучка (кут відхилення  $\theta$ ) після проходження щілини.

*Розв'язання:*

Нехай пучок рухається вздовж осі  $y$ , а вісь  $x$  спрямована вздовж ширини щілини. До проходження екрана електрони мають чітко визначений імпульс  $p_y = p$  та  $p_x = 0$ .

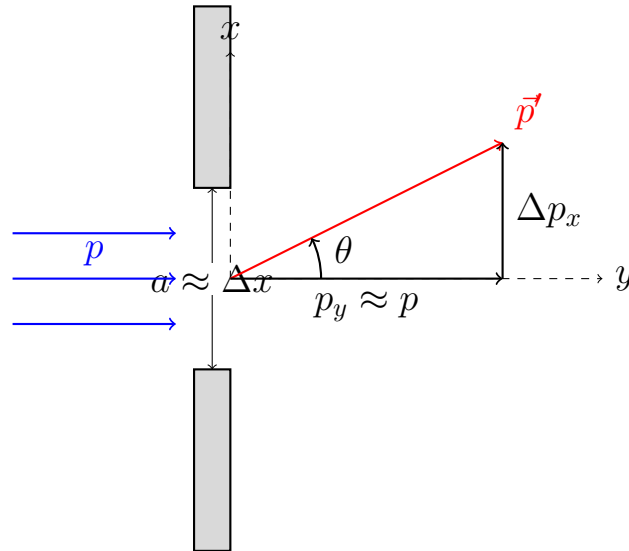


Рис. 2.3. Дифракція електронів на щілині як наслідок співвідношення невизначеностей

Коли електрон проходить крізь щілину, його координата  $x$  стає відомою з точністю до ширини щілини:

$$\Delta x \approx a$$

Згідно зі співвідношенням невизначеностей Гейзенберга ( $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ ), обмеження просторової локалізації неминуче призводить до появи невизначеності проекції імпульсу на вісь  $x$ . За порядком величини ця невизначеність становить:

$$\Delta p_x \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{a}$$

Через появу поперечної складової імпульсу  $\Delta p_x$  електрони відхиляються від початкового напрямку. Для малих кутів відхилення ( $\tan \theta \approx \theta$ ) кутову

розбіжність пучка можна оцінити як відношення виниклої невизначеності поперечного імпульсу до початкового поздовжнього імпульсу:

$$\theta \approx \frac{\Delta p_x}{p}$$

Підставляючи сюди вираз для  $\Delta p_x$ , остаточно отримуємо:

$$\theta \approx \frac{\hbar}{ap}$$

З огляду на співвідношення де Бройля ( $p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ ), отриманий результат  $\theta \sim \frac{\lambda}{a}$  за порядком величини збігається з умовою першого дифракційного мінімуму у хвильовій оптиці. Це наочно демонструє, що дифракція мікрочастинок є прямим наслідком принципу невизначеності.

**Відповідь:**  $\theta \approx \frac{\hbar}{ap}$ .

# Тема 3. Рівняння Шредінгера і закон збереження ймовірності

## Короткі теоретичні відомості та формули

### Хвильове рівняння (нестационарне рівняння Шредінгера)

- Основне рівняння нерелятивістської квантової механіки, що визначає еволюцію хвильової функції  $\Psi(\vec{r}, t)$  у часі, має вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

де  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t)$  — оператор повної енергії (гамільтоніан).

- Це рівняння є детерміністичним: якщо відома хвильова функція в початковий момент часу  $\Psi(\vec{r}, 0)$ , рівняння однозначно визначає її в будь-який наступний момент  $t$ .

### Стационарні стани

- Якщо потенціальна енергія не залежить від часу явно ( $U = U(\vec{r})$ ), квантова система може перебувати у *стационарних станах* — станах із точно визначеною енергією  $E$ .
- Хвильова функція стационарного стану факторизується (розпадається на добуток просторової та часової частин):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

- Просторова частина  $\psi(\vec{r})$  задовольняє *стационарне рівняння Шредінгера*:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) \psi = 0$$

- У стационарному стані густина ймовірності  $w = |\Psi|^2 = |\psi|^2$  не залежить від часу.

### Рівняння неперервності та струм ймовірності

- Зміна ймовірності знайти частинку в заданому об'ємі пов'язана з потоком ймовірності через межі цього об'єму. Це виражається диференціальним законом збереження ймовірності (рівнянням неперервності):

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$$

- Вектор  $\vec{j}$  називається *густиною струму ймовірності* і визначається за формулою:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

Для одновимірного випадку:  $j_x = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x})$ .

## Приклади розв'язаних задач

### Задача 1. Відновлення потенціалу за хвильовою функцією

Частинка масою  $m$  перебуває у стаціонарному стані, просторова частина хвильової функції якого має вигляд  $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ , де  $\alpha > 0$ . Знайти вираз для потенціальної енергії  $U(x)$ , в якій рухається частинка, якщо відомо, що в початку координат  $U(0) = 0$ . Визначити власне значення енергії  $E$  цього стану.

*Розв'язання:*

Підставимо задану функцію  $\psi(x)$  в одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

Знайдемо першу та другу похідні від хвильової функції:

$$\frac{d\psi}{dx} = -2\alpha x \cdot Ae^{-\alpha x^2} = -2\alpha x\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -2\alpha\psi - 2\alpha x \frac{d\psi}{dx} = -2\alpha\psi - 2\alpha x(-2\alpha x\psi) = (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi$$

Підставимо другу похідну у рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi + U(x)\psi = E\psi$$

Оскільки  $\psi(x) \neq 0$ , скоротимо на  $\psi$ :

$$-\frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}x^2 + \frac{\hbar^2\alpha}{m} + U(x) = E$$

Звідси виразимо потенціальну енергію:

$$U(x) = E - \frac{\hbar^2\alpha}{m} + \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}x^2$$

За умовою задачі  $U(0) = 0$ . Підставимо  $x = 0$ :

$$0 = E - \frac{\hbar^2\alpha}{m} \implies E = \frac{\hbar^2\alpha}{m}$$

Ми знайшли енергію стану. Тепер підставимо  $E$  назад у вираз для  $U(x)$ , щоб отримати остаточний вигляд потенціалу:

$$U(x) = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}x^2$$

Отриманий потенціал є квадратичним ( $U \sim x^2$ ), що відповідає квантовому гармонічному осцилятору.

**Відповідь:**  $E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{m}$ ,  $U(x) = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}x^2$ .

### Задача 2. Струм ймовірності для вільної частинки

Стан вільної частинки масою  $m$  описується плоскою хвилею де Бройля:  $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ , де  $A$  — дійсна амплітуда. Знайти густину струму ймовірності  $j$  для цього стану.

*Розв'язання:*

Густина струму ймовірності для одновимірного руху:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$$

Запишемо комплексно-спряжену хвильову функцію:

$$\Psi^*(x, t) = Ae^{-i(kx - \omega t)}$$

Знайдемо частинні похідні по координаті  $x$ :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ikAe^{i(kx - \omega t)} = ik\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} = -ikAe^{-i(kx - \omega t)} = -ik\Psi^*$$

Підставимо ці вирази у формулу для струму:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi(-ik\Psi^*) - \Psi^*(ik\Psi)) = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik|\Psi|^2) = \frac{\hbar k}{m} |\Psi|^2$$

Оскільки  $|\Psi|^2 = A^2$ , а швидкість частинки  $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$ , маємо:

$$j = vA^2$$

Струм ймовірності дорівнює добутку густини ймовірності на класичну швидкість поширення.

**Відповідь:**  $j = \frac{\hbar k}{m} A^2$ .

### Задача 3. Струм ймовірності для зустрічних хвиль

Хвильова функція частинки є суперпозицією двох зустрічних хвиль (падаючої

та відбитої) і має вигляд просторової частини  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ . Знайти густину струму ймовірності для цього стаціонарного стану.

*Розв'язання:*

Оскільки стан стаціонарний, часовий множник  $e^{-iEt/\hbar}$  скоротиться у формулі для струму (через множення  $\Psi\Psi^*$ ), тому можемо обчислювати  $j$  лише за просторовою частиною:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right)$$

Маємо:

$$\begin{aligned} \psi &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi^* &= A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx} \end{aligned}$$

Знаходимо похідні:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} \\ \frac{d\psi^*}{dx} &= -ikA^*e^{-ikx} + ikB^*e^{ikx} \end{aligned}$$

Підставимо у формулу (винесемо  $ik$  за дужки):

$$\psi \frac{d\psi^*}{dx} = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) \cdot ik(-A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}) = ik(-|A|^2 + AB^*e^{2ikx} - A^*Be^{-2ikx} + |B|^2)$$

$$\psi^* \frac{d\psi}{dx} = (A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}) \cdot ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) = ik(|A|^2 - A^*Be^{-2ikx} + AB^*e^{2ikx} - |B|^2)$$

Віднімемо другий вираз від першого:

$$\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} = ik(-2|A|^2 + 2|B|^2) = -2ik(|A|^2 - |B|^2)$$

Домножимо на  $\frac{i\hbar}{2m}$ :

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik(|A|^2 - |B|^2)) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

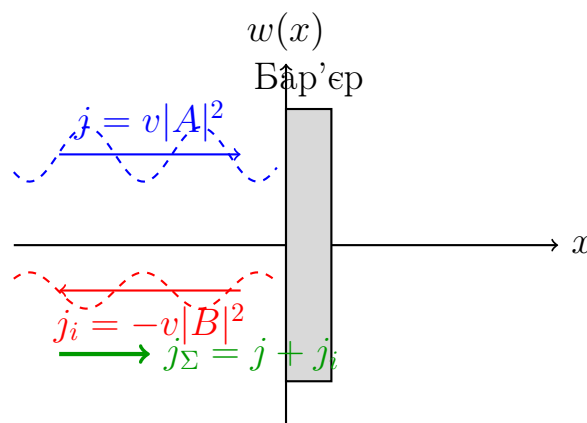


Рис. 3.1. Ілюстрація закону неперервності для потоків ймовірності під час відбивання від бар'єра

**Відповідь:**  $j = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2$ . (Результуючий струм дорівнює різниці струмів падаючої та відбитої хвиль. Інтерференційні доданки взаємно знищуються).

#### Задача 4. Хвильова функція над потенціальною сходиною

Частинка з енергією  $E$  рухається зліва направо ( $x > 0$ ) і натрапляє на потенціальну сходиною:  $U(x) = 0$  при  $x < 0$  та  $U(x) = U_0$  при  $x \geq 0$ . Вважаючи, що  $E > U_0$ , записати загальний вигляд стаціонарних хвильових функцій у обох областях та зобразити їх якісно на рисунку.

*Розв'язання:*

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера для двох областей. В області I ( $x < 0$ ):

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \implies \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0$$

де  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  — хвильове число наблигаючої частинки. Загальний розв'язок у цій області складається з падаючої та відбитої хвиль:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

В області II ( $x > 0$ ):

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0 \implies \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0$$

де  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ . Оскільки за сходиною немає відбиваючих об'єктів, там існує лише хвиля, що пройшла вправо:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

Якісно зобразимо дійсну частину хвильової функції. Оскільки  $E > E - U_0$ , то  $k_1 > k_2$ . Хвильове число обернено пропорційне довжині хвилі де Бройля ( $\lambda = 2\pi/k$ ), тому над сходиною довжина хвилі частинки збільшується ( $\lambda_2 > \lambda_1$ ), а кінетична енергія зменшується.

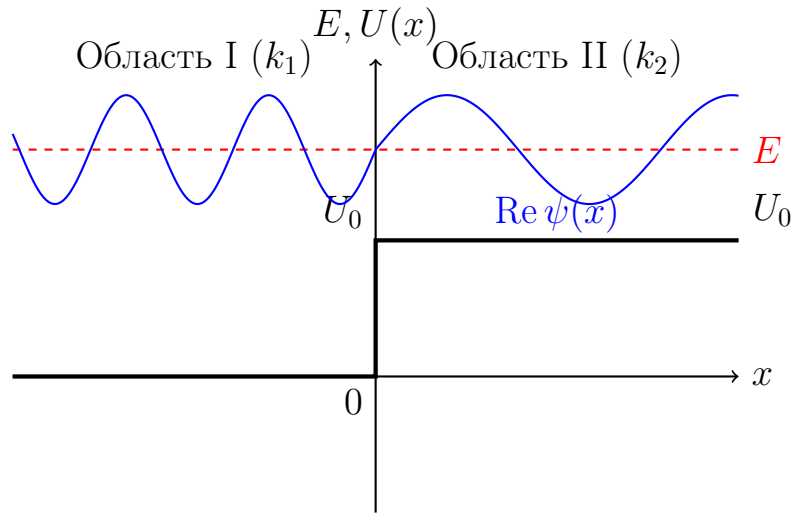


Рис. 3.2. Хвильова функція частинки при проходженні потенціальної сходи

Зображений рисунок наочно демонструє неперервність самої функції в точці  $x = 0$  та збільшення довжини хвилі в Області II. Співвідношення між амплітудами  $A$ ,  $B$  і  $C$  знаходиться з умов зшивання:  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  та  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ .

**Відповідь:**  $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$  ( $x < 0$ );  $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$  ( $x > 0$ ), де  $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ ,  $k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ .

### Задача 5. Зв'язаний стан у дельта-подібній ямі

Частинка масою  $m$  перебуває в полі притягувального потенціалу  $U(x) = -\alpha\delta(x)$ , де  $\alpha > 0$ , а  $\delta(x)$  — функція Дірака. Знайти енергію єдиного стаціонарного зв'язаного стану частинки ( $E < 0$ ).

*Розв'язання:*

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi$$

Для всіх точок  $x \neq 0$  потенціал дорівнює нулю, і рівняння набуває вигляду:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0$$

де введено позначення  $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0$  (оскільки енергія зв'язаного стану від'ємна,  $E = -|E|$ ). Розв'язки для двох областей:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, & x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & x > 0 \end{cases}$$

Умови регулярності вимагають, щоб функція не прямувала до нескінченності при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Отже,  $B = 0$  та  $C = 0$ . Умова неперервності в точці  $x = 0$  дає

$\psi(-0) = \psi(+0) \implies A = D$ . Отже, хвильова функція має вигляд:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}$$

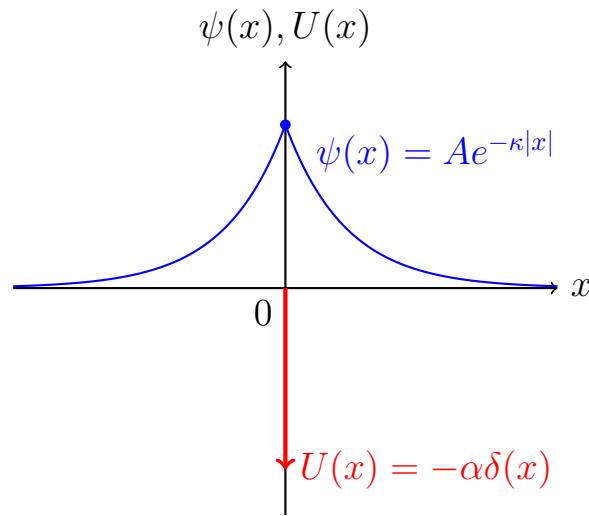


Рис. 3.3. Зв'язаний стан у дельта-подібному потенціалі (злам похідної при  $x = 0$ )

Як видно з рисунка, у точці  $x = 0$  хвильова функція має злам (похідна терпить розрив). Цей розрив зумовлений сингулярністю потенціалу. Знайдемо його, проінтегрувавши вихідне рівняння Шредінгера від  $-\epsilon$  до  $+\epsilon$  і спрямувавши  $\epsilon \rightarrow 0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx - \alpha \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \delta(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx$$

Перший інтеграл дає різницю перших похідних, другий (за властивістю дельта-функції) виділяє значення  $\psi(0)$ , а інтеграл справа прямує до нуля, бо  $\psi(x)$  неперервна та обмежена:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(+0) - \psi'(-0)) - \alpha\psi(0) = 0$$

Знайдемо похідні від нашої функції  $\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}$ :

$$\psi'(+0) = -\kappa A, \quad \psi'(-0) = \kappa A, \quad \psi(0) = A$$

Підставимо їх у знайдену умову зшивання похідних:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-\kappa A - \kappa A) - \alpha A = 0 \implies \frac{\hbar^2 \kappa}{m} A = \alpha A$$

Скорочуючи на  $A$  (амплітуда не нуль), знаходимо параметр  $\kappa$ :

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

Оскільки ми позначали  $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ , звідси знаходимо енергію:

$$\frac{-2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 \implies E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Це єдина можлива енергія дискретного спектра для такої системи.

**Відповідь:**  $E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ .

## Тема 4. Найпростіші задачі квантової механіки

### Короткі теоретичні відомості та формули

#### Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі

Для частинки масою  $m$ , яка знаходиться в ямі шириною  $a$  з нескінченно високими стінками ( $0 < x < a$ ), енергетичний спектр є дискретним (квантованим):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Нормовані власні хвильові функції мають вигляд стоячих хвиль:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Мінімальна енергія (енергія основного стану)  $E_1 \neq 0$ , що є наслідком співвідношення невизначеностей.

#### Лінійний гармонічний осцилятор

Потенціальна енергія осцилятора:  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Розв'язок рівняння Шредінгера дає еквідистантний енергетичний спектр:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Енергія основного стану ( $n = 0$ ) дорівнює  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$  (енергія нульових коливань). Хвильові функції виражаються через поліноми Ерміта. Хвильова функція основного стану має форму гауссівської кривої:  $\psi_0(x) \sim e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ .

#### Тунельний ефект

Квантова частинка може пройти крізь потенціальний бар'єр, навіть якщо її повна енергія менша за висоту бар'єра ( $E < U_0$ ). Це явище називається тунельним ефектом. Імовірність проходження частинки крізь бар'єр характеризується *коефіцієнтом прозорості*  $D$ . Для бар'єра довільної форми  $U(x)$  у квазікласичному наближенні:

$$D \approx D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right)$$

де  $x_1, x_2$  — класичні точки повороту (межі бар'єра, де  $U(x) = E$ ).

### Приклади розв'язаних задач

#### Задача 1. Ймовірність перебування частинки в ямі

Електрон знаходиться в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній

ямі шириною  $a$  в основному стані. Визначити ймовірність знайти електрон у середній третині ями (в інтервалі від  $a/3$  до  $2a/3$ ). Зобразити графічно густину ймовірності для цього стану.

*Розв'язання:*

Хвильова функція основного стану ( $n = 1$ ) має вигляд:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Густина ймовірності знайти частинку в точці  $x$  дорівнює:

$$w_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

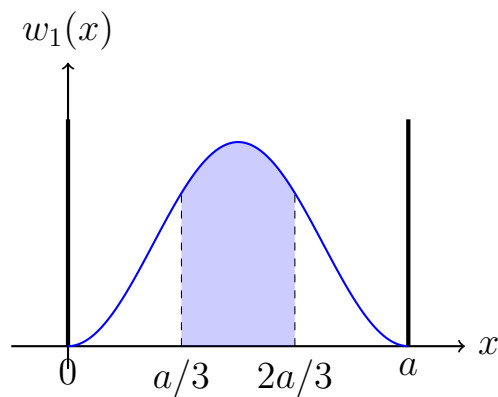


Рис. 4.1. Густина ймовірності для основного стану та площа, що відповідає шуканій ймовірності

Шукана ймовірність  $P$  — це інтеграл від густини ймовірності в заданих межах (на рисунку це заштрихована площа під кривою):

$$P = \int_{a/3}^{2a/3} \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

Використаємо формулу пониження степеня  $\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos(2\alpha)}{2}$ :

$$P = \frac{2}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)}{2} dx = \frac{1}{a} \int_{a/3}^{2a/3} dx - \frac{1}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

Обчислюємо інтеграли:

$$P = \frac{1}{a} \left( \frac{2a}{3} - \frac{a}{3} \right) - \frac{1}{a} \cdot \frac{a}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \Bigg|_{a/3}^{2a/3}$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \left[ \sin\left(\frac{4\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right]$$

Оскільки  $\sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}$  і  $\sin\left(\frac{4\pi}{3}\right) = -\frac{\sqrt{3}}{2}$ , маємо:

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi}$$

Оцінимо числове значення:  $P \approx 0.333 + \frac{1.732}{6.28} \approx 0.333 + 0.276 = 0.609$ . Отже, ймовірність становить близько 61

**Відповідь:**  $P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \approx 61\%$ .

### Задача 2. Тунелювання крізь прямокутний бар'єр

Частинка масою  $m$  та енергією  $E$  налітає на прямокутний потенціальний бар'єр висотою  $U_0$  та шириною  $d$  (причому  $E < U_0$ ). Оцінити коефіцієнт прозорості бар'єра. Зобразити хід хвильової функції.

*Розв'язання:*

Для прямокутного бар'єра ( $U(x) = U_0 = \text{const}$  на інтервалі  $0 < x < d$ ) підінтегральний вираз у формулі для коефіцієнта прозорості є сталим:

$$D \approx D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \sqrt{2m(U_0 - E)} dx\right)$$

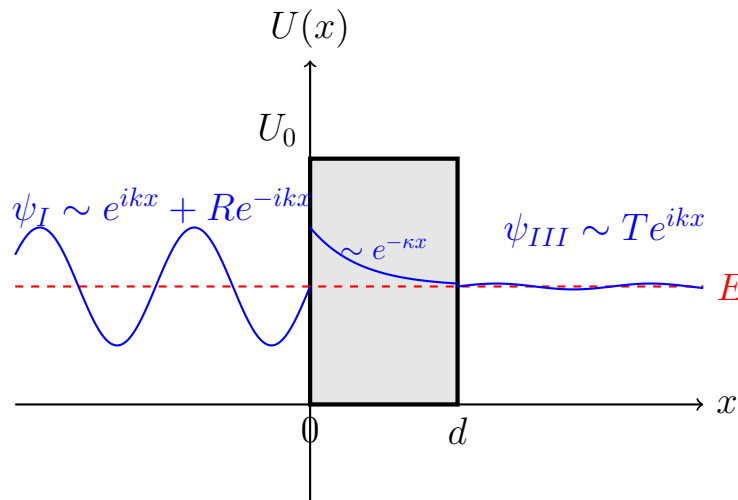


Рис. 4.2. Тунельний ефект: експоненційне згасання хвильової функції під бар'єром

Оскільки  $\sqrt{2m(U_0 - E)}$  не залежить від  $x$ , інтеграл дорівнює просто добутку підінтегрального виразу на ширину бар'єра  $d$ :

$$D \approx D_0 \exp\left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$$

Цей результат показує, що ймовірність проходження частинки крізь бар'єр експоненціально сильно (дуже стрімко) падає при збільшенні ширини бар'єра

$d$  та його "висоти" відносно енергії частинки ( $U_0 - E$ ). Саме ця формула якісно пояснює явище альфа-розпаду важких ядер, автоелектронну емісію та роботу тунельного мікроскопа.

$$\text{Відповідь: } D \approx D_0 \exp\left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right).$$

### Задача 3. Класичні точки повороту квантового осцилятора

Знайти координати точок, у яких класична частинка-осцилятор з енергією, що дорівнює енергії основного квантового стану ( $E_0 = \hbar\omega/2$ ), зупиняється і повертає назад. Порівняти це з поведінкою квантового осцилятора.

*Розв'язання:*

У класичній механіці частинка може рухатися лише там, де її повна енергія  $E$  не менша за потенціальну  $U(x)$ . Точки, де  $E = U(x)$ , називаються класичними точками повороту (в них кінетична енергія дорівнює нулю). Прирівняємо енергію основного стану до потенціальної енергії:

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Звідси знайдемо  $x^2$ :

$$x^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

Отже, класичні точки повороту дорівнюють:

$$x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

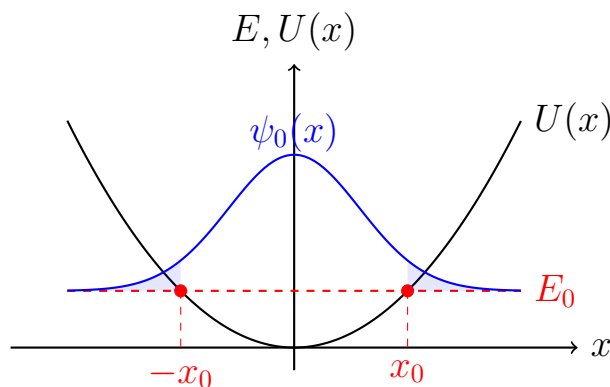


Рис. 4.3. Хвильова функція основного стану гармонічного осцилятора. Заштрихована область ілюструє проникнення частинки в класично заборонену зону.

Як видно з рисунка, квантова хвильова функція  $\psi_0(x)$  (гауссівська крива) не обривається різко в точках  $\pm x_0$ , а плавно спадає експоненціально. Це означає, що у квантовій механіці існує відмінна від нуля ймовірність знайти

частинку в класично забороненій області ( $|x| > x_0$ ), де її "класична" кінетична енергія була б від'ємною. Це явище споріднене з тунельним ефектом.

**Відповідь:**  $x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ . Квантовий осцилятор може проникати за класичні точки повороту.

#### Задача 4. Холодна емісія електронів (автоелектронна емісія)

Електрони в металі перебувають у потенціальній ямі. Для того, щоб вирвати електрон з поверхні металу у вакуум, потрібно виконати роботу виходу  $A$ . Якщо до поверхні металу прикласти сильне зовнішнє однорідне електричне поле напруженістю  $\mathcal{E}$ , потенціальний бар'єр стає трикутним, і електрони можуть тунелювати крізь нього у вакуум. Використовуючи квазікласичне наближення, знайти ймовірність тунелювання (коефіцієнт прозорості  $D$ ) електрона.

*Розв'язання:*

Нехай поверхня металу знаходиться в площині  $x = 0$ , а метал займає область  $x < 0$ . Зовнішнє електричне поле  $\mathcal{E}$  спрямоване до металу, тому на електрон діє сила  $F = e\mathcal{E}$  у додатному напрямку осі  $x$  (де  $e$  — модуль заряду електрона). Потенціальна енергія електрона у вакуумі ( $x > 0$ ) має вигляд:

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x$$

де  $U_0$  — енергія спокою електрона у вакуумі за відсутності поля.

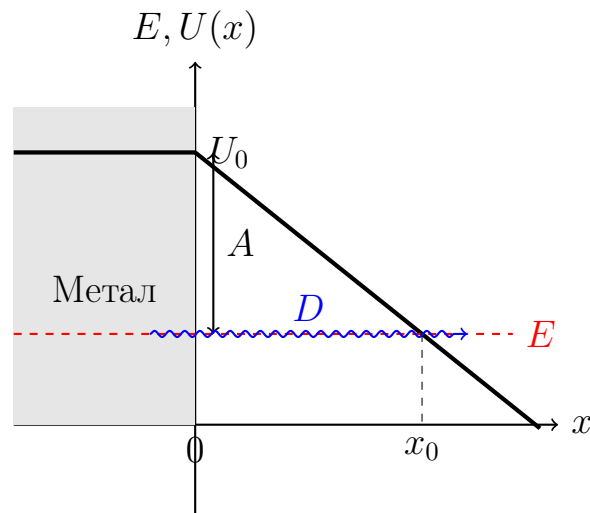


Рис. 4.4. Проходження електрона крізь трикутний потенціальний бар'єр на межі металу

Електрон всередині металу має енергію  $E$ . Різниця між енергією спокою у вакуумі та енергією електрона в металі дорівнює роботі виходу:  $U_0 - E = A$ . Тоді «висота» бар'єра для електрона з енергією  $E$  запишеться як:

$$U(x) - E = U_0 - E - e\mathcal{E}x = A - e\mathcal{E}x$$

Класична точка повороту  $x_0$ , де частинка вийшла б з-під бар'єра ( $U(x_0) = E$ ), знаходиться з умови:

$$A - e\mathcal{E}x_0 = 0 \implies x_0 = \frac{A}{e\mathcal{E}}$$

Скористаємося квазікласичною формулою для коефіцієнта прозорості:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right)$$

Підставимо наш вираз:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{A/e\mathcal{E}} \sqrt{A - e\mathcal{E}x} dx\right)$$

Обчислимо інтеграл. Зробимо заміну змінної:  $y = A - e\mathcal{E}x$ , тоді  $dy = -e\mathcal{E}dx \implies dx = -\frac{dy}{e\mathcal{E}}$ . Межі інтегрування: при  $x = 0 \rightarrow y = A$ ; при  $x = A/e\mathcal{E} \rightarrow y = 0$ .

$$\int_0^{A/e\mathcal{E}} \sqrt{A - e\mathcal{E}x} dx = \int_A^0 \sqrt{y} \left(-\frac{dy}{e\mathcal{E}}\right) = \frac{1}{e\mathcal{E}} \int_0^A y^{1/2} dy = \frac{1}{e\mathcal{E}} \left[\frac{2}{3}y^{3/2}\right]_0^A = \frac{2A^{3/2}}{3e\mathcal{E}}$$

Підставляючи обчислений інтеграл у показник експоненти, остаточно отримуємо:

$$D \approx \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}A^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right)$$

Цей результат (відомий як закон Фаулера-Нордгейма) показує, що ймовірність емісії (а отже, і сила струму) надзвичайно стрімко зростає при збільшенні напруженості електричного поля  $\mathcal{E}$ .

**Відповідь:**  $D \approx \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}A^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right)$ .

### Задача 5. Квантовий осцилятор у зовнішньому електричному полі

Частинка масою  $m$  із зарядом  $q$  здійснює гармонічні коливання з власною частотою  $\omega$  вздовж осі  $x$ . Систему помістили в однорідне зовнішнє електричне поле напруженістю  $\mathcal{E}$ , спрямоване вздовж осі  $x$ . Знайти власні значення енергії та хвильові функції стаціонарних станів такої системи.

*Розв'язання:*

Потенціальна енергія частинки складається з енергії пружної взаємодії (осцилятора) та потенціальної енергії заряду в електричному полі:

$$U_{new}(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - q\mathcal{E}x$$

Стационарне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{m\omega^2 x^2}{2} - q\mathcal{E}x \right) \psi = E\psi$$

Перетворимо вираз для потенціальної енергії, застосувавши метод виділення повного квадрата. Винесемо  $\frac{m\omega^2}{2}$  за дужки:

$$U_{new}(x) = \frac{m\omega^2}{2} \left( x^2 - \frac{2q\mathcal{E}}{m\omega^2} x \right)$$

Додамо і віднімемо в дужках квадрат виразу  $\left( \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)$ , щоб згорнути формулу  $(a - b)^2$ :

$$U_{new}(x) = \frac{m\omega^2}{2} \left( x^2 - 2x \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} + \left( \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \left( \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 \right)$$

$$U_{new}(x) = \frac{m\omega^2}{2} \left( x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

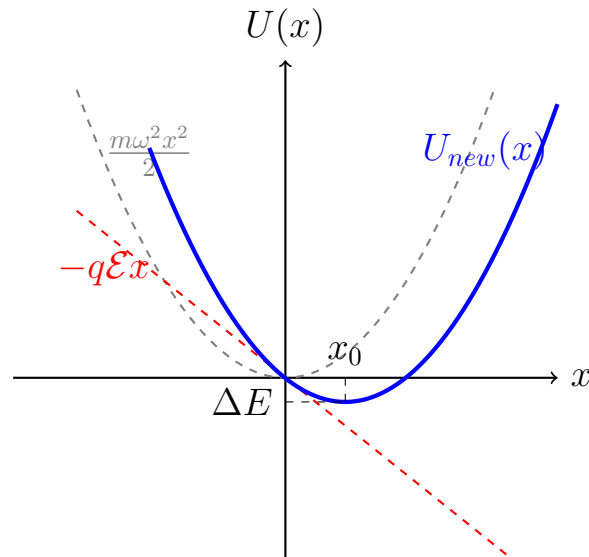


Рис. 4.5. Зміщення потенціальної ями гармонічного осцилятора під дією однорідного електричного поля

Введемо позначення:  $x_0 = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$  — нове положення рівноваги;  $\Delta E = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$  — константа, що має розмірність енергії. Тепер потенціальна енергія набуває простого вигляду:

$$U_{new}(x) = \frac{m\omega^2}{2} (x - x_0)^2 - \Delta E$$

Підставимо цей вираз у рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} (x - x_0)^2 \psi = (E + \Delta E) \psi$$

Зробимо заміну координат  $y = x - x_0$ . Оскільки  $dx = dy$ , оператор другої похідної не зміниться ( $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{dy^2}$ ). Рівняння набуде класичного вигляду для гармонічного осцилятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2} \psi = E' \psi$$

де ефективна енергія  $E' = E + \Delta E$ . Як відомо, енергетичний спектр звичайного осцилятора:  $E'_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Тоді власні значення енергії нашої системи:

$$E_n = E'_n - \Delta E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

Хвильові функції стаціонарних станів просто зсуваються в просторі на величину  $x_0$ :

$$\psi_n(x) = \psi_n^{(osc)}(x - x_0)$$

де  $\psi_n^{(osc)}$  — відомі хвильові функції незбуреного гармонічного осцилятора (через поліноми Ерміта). Отже, електричне поле не змінює відстань між енергетичними рівнями (вона залишається  $\hbar\omega$ ), а лише зсуває всю систему рівнів вниз на величину  $\Delta E$  і зміщує положення рівноваги осцилятора в точку  $x_0$ .

**Відповідь:**  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad \psi_n(x) = \psi_n^{(osc)} \left(x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}\right)$ .

### Задача 6. Зв'язані стани в напівнескінченній потенціальній ямі

Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірній потенціальній ямі, яка з одного боку обмежена нескінченно високою стінкою, а з іншого — скінченим бар'єром:  $U(x) = \infty$  при  $x < 0$ ;  $U(x) = 0$  при  $0 \leq x \leq a$ ;  $U(x) = U_0$  при  $x > a$ . Отримати трансцендентне рівняння для визначення енергії дискретних (зв'язаних) станів частинки ( $0 < E < U_0$ ).

*Розв'язання:*

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера для трьох областей простору.

1) В області I ( $x < 0$ ) потенціальна енергія нескінченна, тому частинка туди проникнути не може. Отже, хвильова функція тотожно дорівнює нулю:  $\psi_1(x) = 0$ .

2) В області II (всередині ями,  $0 \leq x \leq a$ ) маємо вільний рух ( $U = 0$ ):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = E\psi_2 \implies \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k^2\psi_2 = 0$$

де  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ . Загальний розв'язок:  $\psi_2(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ . З умови неперервності хвильової функції в точці  $x = 0$  маємо:

$$\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0 \implies A \sin(0) + B \cos(0) = 0 \implies B = 0$$

Тому всередині ями:  $\psi_2(x) = A \sin(kx)$ .

3) В області III ( $x > a$ ) частинка перебуває під бар'єром ( $E < U_0$ ):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + U_0\psi_3 = E\psi_3 \implies \frac{d^2\psi_3}{dx^2} - \kappa^2\psi_3 = 0$$

де  $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$ . Загальний розв'язок:  $\psi_3(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$ . З умови обмеженості хвильової функції на нескінченності ( $\psi \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$ ) випливає, що  $D = 0$ . Отже, під бар'єром:  $\psi_3(x) = Ce^{-\kappa x}$ .

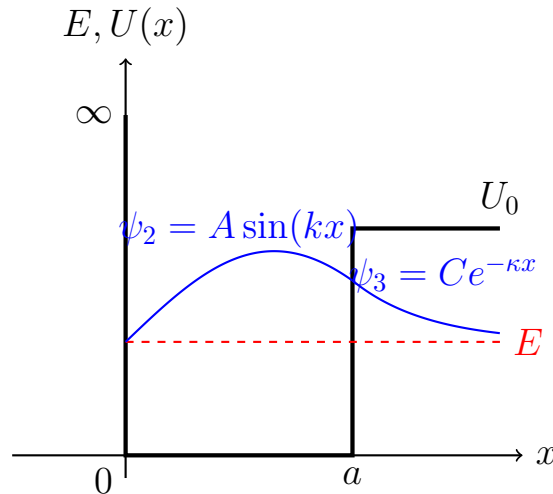


Рис. 4.6. Зв'язаний стан в асиметричній потенціальній ямі. Функція обнуляється на лівій межі та експоненціально загасає на правій

Тепер застосуємо умови зшивання на правій межі ями ( $x = a$ ). Хвильова функція та її перша похідна мають бути неперервними: 1)  $\psi_2(a) = \psi_3(a) \implies A \sin(ka) = Ce^{-\kappa a}$  2)  $\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \implies Ak \cos(ka) = -C\kappa e^{-\kappa a}$

Поділимо друге рівняння на перше (амплітуди  $A$  та  $C$  скоротяться, а також експонента):

$$\frac{Ak \cos(ka)}{A \sin(ka)} = \frac{-C\kappa e^{-\kappa a}}{Ce^{-\kappa a}}$$

$$k \operatorname{ctg}(ka) = -\kappa$$

Отримане рівняння є шуканим трансцендентним рівнянням. Щоб проаналізувати його, помножимо обидві частини на  $a$  та введемо безрозмірні змінні:  $\xi = ka$  та  $\eta = \kappa a$ . Тоді рівняння набуде вигляду:

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta$$

При цьому змінні  $\xi$  та  $\eta$  пов'язані між собою (оскільки обидві залежать від енергії  $E$ ):

$$\xi^2 + \eta^2 = k^2 a^2 + \kappa^2 a^2 = \frac{2mEa^2}{\hbar^2} + \frac{2m(U_0 - E)a^2}{\hbar^2} = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \equiv R^2$$

Величина  $R$  фіксована для конкретної ями (залежить лише від її ширини  $a$  та глибини  $U_0$ ). Рівняння розв'язується графічно шляхом знаходження точок перетину кривих  $f(\xi) = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  та кола  $\eta = \sqrt{R^2 - \xi^2}$  у першій чверті ( $\xi > 0, \eta > 0$ ). Оскільки котангенс має бути від'ємним, розв'язки існують лише в інтервалах  $\pi/2 < \xi < \pi, 3\pi/2 < \xi < 2\pi$  тощо. Звідси випливає, що якщо  $R < \pi/2$  (яма надто мілка або вузька), у ній взагалі не існує жодного зв'язаного стану.

**Відповідь:** Трансцендентне рівняння:  $k \operatorname{ctg}(ka) = -\kappa$ , де  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ,  $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ .

### Задача 7. Неперервний спектр у напівнескінченній потенціальній ямі

Розглянути ту саму потенціальну яму, що й у попередній задачі:  $U(x) = \infty$  при  $x < 0$ ;  $U(x) = 0$  при  $0 \leq x \leq a$ ;  $U(x) = U_0$  при  $x > a$ . Проте тепер частинка має енергію  $E > U_0$  (неперервний спектр) і налітає на яму з боку  $x \rightarrow +\infty$ . Знайти хвильові функції стаціонарного стану та визначити зсув фази відбитої хвилі.

*Розв'язання:*

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера для тих самих трьох областей простору.

1) В області I ( $x < 0$ ) потенціальна енергія нескінченна, тому частинка туди не проникає:  $\psi_1(x) = 0$ .

2) В області II (всередині ями,  $0 \leq x \leq a$ ) кінетична енергія дорівнює  $E$ , рівняння має вигляд:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_1^2\psi_2 = 0, \quad \text{де} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

З урахуванням граничної умови  $\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0$ , розв'язок є синусоїдою:

$$\psi_2(x) = A \sin(k_1 x)$$

3) В області III ( $x > a$ ) частинка рухається над бар'єром ( $E > U_0$ ). Рівняння:

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_2^2\psi_3 = 0, \quad \text{де} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

Оскільки зліва знаходиться нескінченна стінка, яка ідеально відбиває частинки, імовірність пройти в область  $x < 0$  дорівнює нулю. Це означає, що інтенсивність відбитої хвилі дорівнює інтенсивності падаючої (коефіцієнт відбивання  $R = 1$ ). Тому в області III утворюється стояча хвиля, яку найзручніше записати через дійсну тригонометричну функцію з деякою початковою фазою  $\delta$  та амплітудою  $F$ :

$$\psi_3(x) = F \sin(k_2(x - a) + \delta)$$

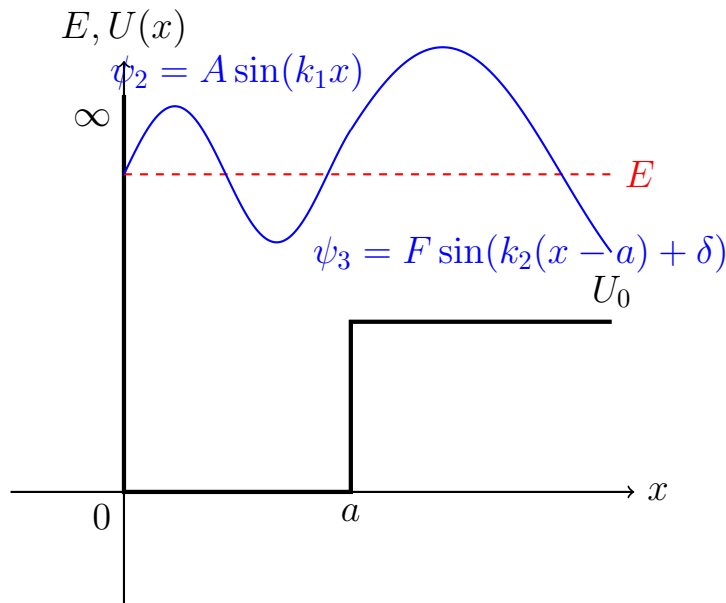


Рис. 4.7. Неперервний спектр. Хвильова функція осцилює в обох областях, але з різною довжиною хвилі (оскільки  $k_1 > k_2$ ).

Для знаходження фази  $\delta$  та зв'язку між амплітудами  $A$  і  $F$ , застосуємо стандартні умови зшивання в точці  $x = a$ : 1) Неперервність функції:  $\psi_2(a) = \psi_3(a) \implies A \sin(k_1 a) = F \sin(\delta)$  2) Неперервність похідної:  $\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \implies Ak_1 \cos(k_1 a) = Fk_2 \cos(\delta)$

Поділимо перше рівняння на друге:

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg}(k_1 a) = \frac{1}{k_2} \operatorname{tg}(\delta)$$

Звідси знаходимо зсув фази відбитої хвилі:

$$\operatorname{tg}(\delta) = \frac{k_2}{k_1} \operatorname{tg}(k_1 a) \implies \delta = \operatorname{arctg} \left( \frac{k_2}{k_1} \operatorname{tg}(k_1 a) \right)$$

Отже, для неперервного спектра енергія  $E$  може набувати будь-яких довільних значень  $E > U_0$ . При цьому частинка не може бути захоплена ямою: падаюча хвиля завжди повністю відбивається ( $R = 1$ ), але взаємодія з ямою призводить до зміни фази відбитої хвилі на величину  $\delta$ , яка залежить від енергії частинки та геометрії потенціалу.

**Відповідь:**  $\psi_2(x) = A \sin(k_1 x)$ ,  $\psi_3(x) = F \sin(k_2(x - a) + \delta)$ , де фаза  $\delta = \operatorname{arctg} \left( \frac{k_2}{k_1} \operatorname{tg}(k_1 a) \right)$ ,  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ,  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ .

### Задача 8. Умова існування дискретних рівнів (графічний аналіз)

Користуючись трансцендентним рівнянням, отриманим у Задачі 6, знайти умову, за якої в асиметричній потенціальній ямі (з однією нескінченною та однією скінченною стінкою висотою  $U_0$ ) існує хоча б один дискретний рівень

енергії. Якою має бути мінімальна ширина  $a$  та глибина  $U_0$  ями для утворення зв'язаного стану?

*Розв'язання:*

У Задачі 6 ми отримали систему з двох рівнянь для безрозмірних змінних  $\xi = \frac{a\sqrt{2mE}}{\hbar}$  та  $\eta = \frac{a\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$ : 1)  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  (трансцендентне рівняння з умов зшивання). 2)  $\xi^2 + \eta^2 = R^2$ , де  $R = \frac{a\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$  — безрозмірний параметр («радіус»), що характеризує саму яму.

Оскільки за фізичним змістом  $\xi > 0$  та  $\eta > 0$  (хвильові числа додатні), розв'язки існують лише у першій чверті координатної площини  $(\xi, \eta)$ . Функція  $f(\xi) = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  є додатною лише там, де котангенс від'ємний, тобто в інтервалах:

$$\frac{\pi}{2} < \xi < \pi; \quad \frac{3\pi}{2} < \xi < 2\pi; \quad \dots$$

Перша гілка цієї функції починається в точці  $\xi = \pi/2$  (де  $\eta = 0$ ) і асимптотично прямує до нескінченності при  $\xi \rightarrow \pi$ .

Друге рівняння  $\xi^2 + \eta^2 = R^2$  описує коло радіуса  $R$  із центром у початку координат. Дискретні рівні енергії відповідають точкам перетину кола та графіка функції  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ .

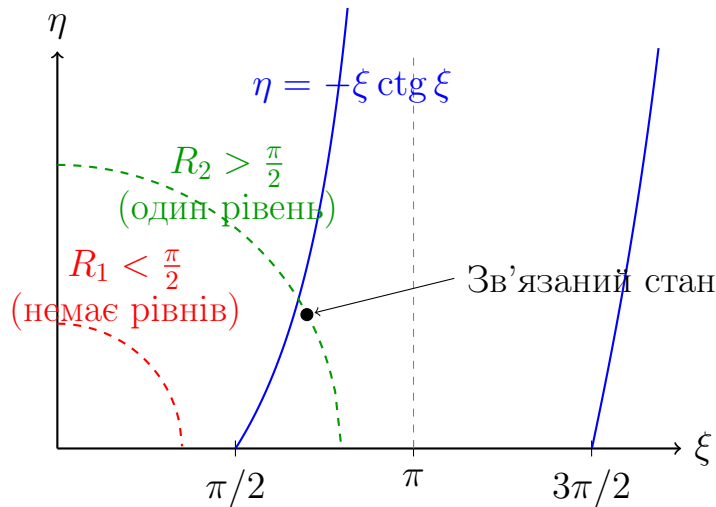


Рис. 4.8. Графічне розв'язування трансцендентного рівняння для асиметричної ями

З рисунка 4.8 чітко видно: для того, щоб коло перетнуло хоча б першу гілку графіка, його радіус  $R$  має бути більшим за точку початку цієї гілки на осі абсцис, тобто  $R > \pi/2$ . Запишемо цю умову через фізичні параметри ями:

$$\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\hbar} > \frac{\pi}{2} \implies \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

Звідси легко виразити мінімальну необхідну глибину ями  $U_{min}$  (при заданій ширині  $a$ ) або мінімальну ширину  $a_{min}$  (при заданій глибині  $U_0$ ):

$$U_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Цікаво порівняти цей результат із симетричною потенціальною ямою (де обидві стінки скінченні). У повністю симетричній ямі завжди існує хоча б один зв'язаний стан, якою б мілкою вона не була. А от в асиметричній ямі (або у тривимірній сферичній ямі, яка зводиться до аналогічного рівняння) яма повинна мати певну мінімальну «ємність» ( $U_0 a^2$ ), щоб утримати частинку.

**Відповідь:** Для існування дискретного рівня необхідно, щоб  $U_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$ .

## Тема 5. Момент кількості руху і спін

### Короткі теоретичні відомості та формули

#### Оператори моменту кількості руху

- У квантовій механіці орбітальний момент кількості руху визначається як векторний добуток оператора координати та імпульсу:  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ .
- Проекції моменту не комутують між собою:  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ ,  $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ ,  $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$ . Це означає, що одночасно можна точно виміряти лише одну проекцію моменту (зазвичай обирають  $\hat{L}_z$ ) та його квадрат  $\hat{L}^2$ .

#### Власні значення (просторове квантування)

- Власні значення квадрата моменту є дискретними і визначаються формулою:

$$\hat{L}^2\Psi = \hbar^2 l(l+1)\Psi$$

де  $l = 0, 1, 2, \dots$  — орбітальне квантове число.

- Власні значення проекції моменту на виділену вісь  $z$ :

$$\hat{L}_z\Psi = \hbar m\Psi$$

де  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$  — магнітне квантове число (всього  $2l+1$  значень).

#### Спін та оператори спіна

- Спін — це власний внутрішній момент кількості руху частинки, не пов'язаний з її переміщенням у просторі (не має класичного аналога).
- Квадрат спіну дорівнює  $\hat{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)$ . Для електрона  $s = 1/2$ .
- Проекція спіну електрона на будь-яку вісь може набувати лише двох значень:  $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$ .
- Оператори проекцій спіну виражаються через матриці Паулі  $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$ :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Спіновий стан електрона описується двокомпонентним вектором (спінором):  $\chi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ , де  $|c_1|^2$  і  $|c_2|^2$  — ймовірності знайти спін напрямленим паралельно та антипаралельно осі  $z$  відповідно.

## Приклади розв'язаних задач

### Задача 1. Комутатор проєкцій моменту імпульсу

Користуючись явним виглядом операторів координат та імпульсу, обчислити комутатор  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ .

*Розв'язання:*

Оператори проєкцій моменту мають вигляд:

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

Обчислимо комутатор  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{L}_x, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$ . Використаємо лінійність комутатора:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{L}_x, z\hat{p}_x] - [\hat{L}_x, x\hat{p}_z]$$

Оскільки  $\hat{L}_x$  діє лише на змінні  $y$  та  $z$ , він комутує з  $x$  та  $\hat{p}_x$ :

$$[\hat{L}_x, z\hat{p}_x] = [\hat{L}_x, z]\hat{p}_x = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z]\hat{p}_x$$

Змінні  $y$  та  $\hat{p}_y$  комутують із  $z$ . Оператор  $\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ , тому комутатор  $[\hat{p}_z, z] = -i\hbar$ . Отже,  $[y\hat{p}_z, z]\hat{p}_x = y[\hat{p}_z, z]\hat{p}_x = -i\hbar y\hat{p}_x$ .

Тепер розглянемо другий доданок  $[\hat{L}_x, x\hat{p}_z] = x[\hat{L}_x, \hat{p}_z]$ :

$$x[\hat{L}_x, \hat{p}_z] = x[y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \hat{p}_z] = -x[z\hat{p}_y, \hat{p}_z] = -x[z, \hat{p}_z]\hat{p}_y$$

Оскільки  $[z, \hat{p}_z] = i\hbar$ , маємо:

$$-x(i\hbar)\hat{p}_y = -i\hbar x\hat{p}_y$$

Підставляємо все у вихідний вираз:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -i\hbar y\hat{p}_x - (-i\hbar x\hat{p}_y) = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)$$

Вираз у дужках є оператором  $\hat{L}_z$ . Отже:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

**Відповідь:**  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ . Через те, що комутатор не дорівнює нулю, проєкції моменту не можуть бути виміряні одночасно.

### Задача 2. Просторове квантування моменту

Для стану електрона з орбітальним квантовим числом  $l = 1$  знайти всі можливі значення кута  $\theta$  між вектором орбітального моменту та віссю  $z$ .

*Розв'язання:*

Модуль вектора орбітального моменту жорстко фіксований квантовим числом  $l$ :

$$|\vec{L}| = \sqrt{L^2} = \sqrt{\hbar^2 l(l+1)}$$

Для  $l = 1$  отримуємо:

$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{1(1+1)} = \hbar\sqrt{2}$$

Проекція моменту на вісь  $z$  може приймати  $2l + 1 = 3$  дискретних значення:  $L_z = m\hbar$ , де  $m \in \{-1, 0, 1\}$ . З класичної геометрії косинус кута між вектором і віссю  $z$  дорівнює відношенню проекції до модуля вектора:

$$\cos \theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m\hbar}{\hbar\sqrt{2}} = \frac{m}{\sqrt{2}}$$

Знайдемо кути для кожного можливого значення  $m$ :

1. Для  $m = 1$ :  $\cos \theta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \implies \theta_1 = 45^\circ$
2. Для  $m = 0$ :  $\cos \theta_2 = 0 \implies \theta_2 = 90^\circ$
3. Для  $m = -1$ :  $\cos \theta_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \implies \theta_3 = 135^\circ$

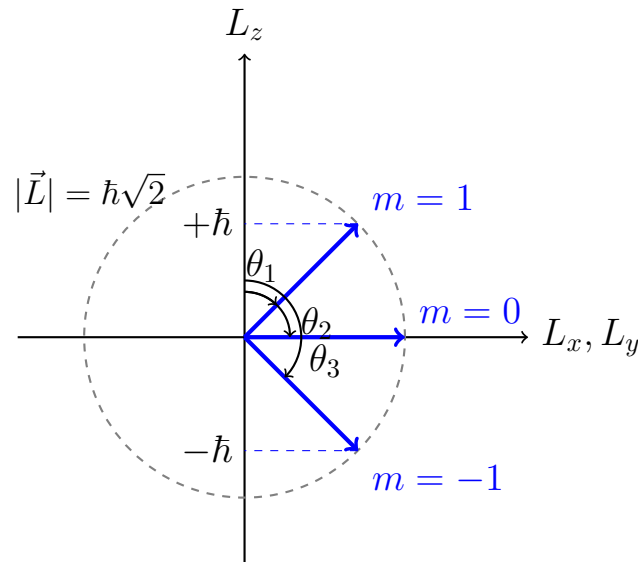


Рис. 5.1. Можливі орієнтації вектора орбітального моменту ( $l = 1$ ) відносно осі  $z$

Як видно з рисунка та розрахунків, вектор моменту принципово не може збігатися з віссю  $z$  (кут ніколи не дорівнює  $0^\circ$ ). Це прямий наслідок принципу невизначеності: якби вектор був точно паралельним до  $z$ , проекції  $L_x$  та  $L_y$  дорівнювали б точно нулю, що неможливо через їхнє взаємне не-комутування.

**Відповідь:**  $\theta \in \{45^\circ, 90^\circ, 135^\circ\}$ .

### Задача 3. Властивості матриць Паулі

Довести алгебраїчні властивості матриць Паулі: 1) Їхні квадрати дорівнюють одиничній матриці:  $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}$ . 2) Вони антикомутують між собою, наприклад:  $\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 0$ .

*Розв'язання:*

Використаємо явний вигляд матриць Паулі та правила множення матриць "рядок на стовпець". 1) Піднесемо до квадрата матрицю  $\hat{\sigma}_x$ :

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 & 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 \\ 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 & 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}$$

Аналогічно для  $\hat{\sigma}_y$ :

$$\hat{\sigma}_y^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \cdot i & 0 \\ 0 & i \cdot (-i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}$$

2) Знайдемо добутки  $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$  та  $\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x$ :

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i \hat{\sigma}_z$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i \hat{\sigma}_z$$

Тепер знайдемо антикомутатор, додавши ці два вирази:

$$\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = i \hat{\sigma}_z + (-i \hat{\sigma}_z) = 0$$

**Відповідь:** Властивості успішно доведено безпосереднім перемноженням матриць.

#### Задача 4. Ймовірності та середні значення спіну

Спіновий стан електрона описується нормованим спінором  $\chi = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 \\ i \end{pmatrix}$ . Визначити ймовірності виміряти проекцію спіну на вісь  $z$  рівною  $+\hbar/2$  та  $-\hbar/2$ , а також обчислити середнє значення  $\langle S_z \rangle$ .

*Розв'язання:*

Спінор  $\chi$  можна записати як суперпозицію базисних станів (власних векторів матриці  $\sigma_z$ ):

$$\chi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Згідно з умовою:  $c_1 = \frac{2}{\sqrt{5}}$  та  $c_2 = \frac{i}{\sqrt{5}}$ .

Квадрат модуля верхньої компоненти  $c_1$  дає ймовірність того, що спін направлений вгору ( $S_z = +\hbar/2$ ):

$$P_+ = |c_1|^2 = \left| \frac{2}{\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{4}{5} = 0.8 \quad (80\%)$$

Квадрат модуля нижньої компоненти  $c_2$  дає ймовірність того, що спін направлений вниз ( $S_z = -\hbar/2$ ):

$$P_- = |c_2|^2 = \left| \frac{i}{\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{i \cdot (-i)}{5} = \frac{1}{5} = 0.2 \quad (20\%)$$

Сума ймовірностей дорівнює одиниці ( $P_+ + P_- = 1$ ), що свідчить про правильне нормування заданого спінора.

Середнє значення проекції спіну обчислюється як математичне сподівання:

$$\langle S_z \rangle = P_+ \left( +\frac{\hbar}{2} \right) + P_- \left( -\frac{\hbar}{2} \right)$$

Підставляємо знайдені ймовірності:

$$\langle S_z \rangle = \frac{4}{5} \left( \frac{\hbar}{2} \right) - \frac{1}{5} \left( \frac{\hbar}{2} \right) = \frac{3}{5} \cdot \frac{\hbar}{2} = 0.3\hbar$$

**Відповідь:**  $P_+ = 80\%$ ,  $P_- = 20\%$ ;  $\langle S_z \rangle = 0.3\hbar$ .

### Задача 5. Енергія спіну в магнітному полі

Електрон перебуває в однорідному магнітному полі з індукцією  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . Знайти власні значення енергії взаємодії спіну електрона з цим магнітним полем та відповідні стаціонарні стани (спінори).

*Розв'язання:*

Гамільтоніан взаємодії магнітного моменту електрона  $\hat{\vec{\mu}}$  із зовнішнім магнітним полем  $\vec{B}$  має вигляд:

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$$

Власний магнітний момент електрона пропорційний його спіну  $\hat{\vec{\mu}} = -\frac{e}{m_e c} \hat{\vec{S}} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{S}}$ , де  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$  — магнетон Бора. Тоді гамільтоніан запишеться як:

$$\hat{H} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}$$

Оскільки поле напрямлене вздовж осі  $z$ , маємо скалярний добуток  $\vec{B} \cdot \hat{\vec{S}} = B \hat{S}_z$ . Виразимо оператор проекції спіну через матрицю Паулі:  $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$ . Тоді матриця гамільтоніана:

$$\hat{H} = \mu_B B \hat{\sigma}_z = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}$$

Оскільки матриця гамільтоніана діагональна, її власні значення є просто елементами на головній діагоналі:

$$E_1 = \mu_B B, \quad E_2 = -\mu_B B$$

Відповідні їм нормовані власні вектори (спінори):

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{спін паралельний полю})$$

$$\chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{спін антипаралельний полю})$$

Різниця енергій між цими станами становить  $\Delta E = 2\mu_B B$ . Це явище розщеплення енергетичних рівнів у магнітному полі лежить в основі електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).

**Відповідь:**  $E_{1,2} = \pm\mu_B B$ ,  $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

### Задача 6. Ларморова прецесія спіну

У початковий момент часу  $t = 0$  спін електрона орієнтований вздовж осі  $x$  (стан описується спінором  $\chi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ). Електрон помістили в однорідне магнітне поле  $\vec{B}$ , напрямлене вздовж осі  $z$ . Знайти залежність від часу середніх значень проекцій спіну  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  та  $\langle S_z \rangle$ .

*Розв'язання:*

Стан електрона еволюціонує згідно з нестационарним рівнянням Шредінгера. Оскільки гамільтоніан  $\hat{H} = \mu_B B \hat{\sigma}_z$  не залежить від часу, спінор у довільний момент часу  $t$  можна отримати за допомогою оператора еволюції:

$$\chi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \chi(0)$$

Підставимо матрицю гамільтоніана:

$$\chi(t) = \exp\left(-i \frac{\mu_B B}{\hbar} t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Введемо позначення Ларморової частоти  $\omega = \frac{2\mu_B B}{\hbar}$ . Тоді показник експоненти містить множник  $\omega/2$ . Експонента від діагональної матриці є матрицею, на діагоналі якої стоять експоненти від відповідних елементів:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

Тепер знайдемо середні значення проекцій спіну. Використовуємо загальну формулу  $\langle S_k \rangle = \chi^\dagger(t) \hat{S}_k \chi(t)$ :

1) Для осі  $z$ :

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ -e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4}(1 - 1) = 0$$

2) Для осі  $x$ :

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} \\ e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

За формулою Ейлера  $e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} = 2 \cos \alpha$ , тому:  $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t)$ .

3) Для осі  $y$ :

$$\langle S_y \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ie^{i\omega t/2} \\ ie^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (-ie^{i\omega t} + ie^{-i\omega t})$$

Оскільки  $e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} = 2i \sin \alpha$ , маємо:  $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{4}(2i \sin(\omega t)) \cdot (-i) = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t)$ .

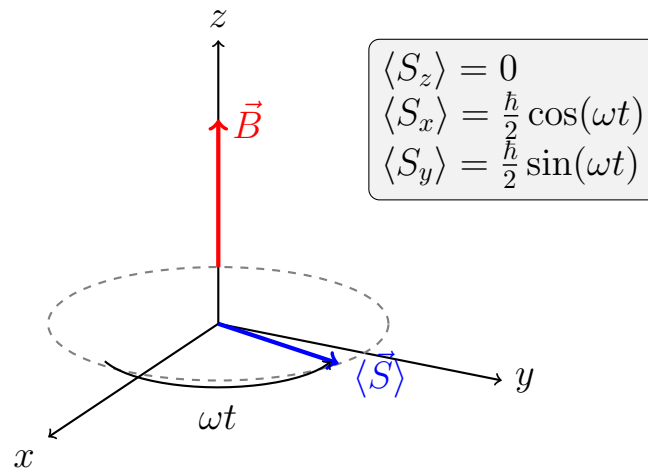


Рис. 5.2. Ларморова прецесія вектора середнього спіну електрона в магнітному полі

**Відповідь:**  $\langle S_z \rangle = 0$ ,  $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t)$ ,  $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t)$ . Вектор середнього спіну обертається (прецесує) в площині  $xy$  з частотою  $\omega = \frac{2\mu_B B}{\hbar}$ .

## Тема 6. Квантові стани в центральній-симетричному полі

### Короткі теоретичні відомості та формули

#### Радіальне рівняння Шредінгера

Якщо потенціальна енергія частинки залежить лише від відстані до силового центру  $U = U(r)$ , поле є центральній-симетричним. У такому полі зберігається момент кількості руху, а хвильова функція розділяється на добуток радіальної та кутової частин:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

де  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — сферичні функції. Радіальна функція  $R(r)$  задовольняє рівняння, яке після заміни  $\chi(r) = rR(r)$  зводиться до одновимірного рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left( U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) \chi = E\chi$$

Доданок  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$  називається *відцентровою енергією*. Він створює додатковий потенціальний бар'єр, що "не пускає" частинки з ненульовим орбітальним моментом ( $l > 0$ ) до центру поля.

#### Теорія атома водню

В атомі водню електрон рухається в кулонівському полі ядра:  $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  (в системі СІ). Розв'язок радіального рівняння для дискретного спектра ( $E < 0$ ) дає квантовані значення енергії:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

де  $n$  — головне квантове число, яке цілком визначає енергію. Для заданого  $n$  орбітальне квантове число  $l$  може набувати значень  $0, 1, \dots, n-1$ . Магнітне число  $m$  змінюється від  $-l$  до  $+l$ . Хвильова функція основного стану ( $n = 1, l = 0, m = 0$ ):

$$\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

де  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}$  — борівський радіус.

#### Сферична прямокутна яма (модель сферичної квантової точки)

Іншим важливим прикладом центральній-симетричного поля є сферична потенціальна яма. Вона широко використовується у нанофізиці для моделювання електронних і діркових станів у сферичних нанокристалах (напівпровідникових квантових точках). У середині ями радіальне рівняння Шредінгера розв'язується через сферичні функції Бесселя.

## Приклади розв'язаних задач

### Задача 1. Найбільш імовірний радіус в атомі водню

Електрон в атомі водню перебуває в основному 1s-стані. Визначити найбільш імовірну відстань від електрона до ядра та порівняти її з радіусом першої борівської орбіти.

*Розв'язання:*

Хвильова функція основного стану має вигляд  $\Psi_{100}(r) = Ce^{-r/a_0}$ . Ймовірність знайти електрон в елементі об'єму  $dV$  дорівнює  $dP = |\Psi|^2 dV$ . Оскільки стан сферично симетричний, елемент об'єму зручно вибрати у вигляді нескінченно тонкого сферичного шару товщиною  $dr$ :  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Тоді ймовірність виявити електрон на відстані  $r$  від ядра дорівнює:

$$dP = |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = W(r) dr$$

де  $W(r) = 4\pi r^2 |\Psi(r)|^2$  — радіальна густина ймовірності. Підставимо хвильову функцію:

$$W(r) = 4\pi r^2 C^2 e^{-2r/a_0}$$

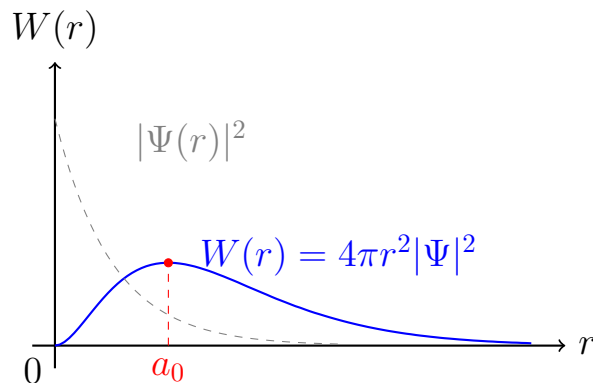


Рис. 6.1. Радіальна густина ймовірності  $W(r)$  для основного стану атома водню. Хоча сама хвильова функція максимальна в нулі, ймовірність знайти там електрон дорівнює нулю через множник  $r^2$ .

Щоб знайти найбільш імовірну відстань (максимум функції  $W(r)$ ), порівняємо її першу похідну до нуля:

$$\frac{dW}{dr} = 4\pi C^2 \frac{d}{dr} \left( r^2 e^{-2r/a_0} \right) = 4\pi C^2 \left( 2r e^{-2r/a_0} + r^2 \left( -\frac{2}{a_0} \right) e^{-2r/a_0} \right) = 0$$

Скоротимо на спільні ненульові множники (оскільки  $r \neq 0$  і експонента не дорівнює нулю):

$$2 - \frac{2r}{a_0} = 0 \implies r = a_0$$

Отже, найбільш імовірна відстань електрона від ядра точно збігається з радіусом першої орбіти в напівкласичній теорії Бора ( $a_0$ ). Проте, на відміну

від теорії Бора, електрон не рухається по чіткій коловій орбіті, а має відмінну від нуля ймовірність перебувати як ближче, так і далі від ядра.

**Відповідь:**  $r_{max} = a_0$ .

### Задача 2. Електронні стани у сферичній квантовій точці

Напівпровідникова сферична квантова точка радіуса  $R$  моделюється як нескінченно глибока сферично-симетрична потенціальна яма ( $U(r) = 0$  при  $r < R$  та  $U(r) = \infty$  при  $r \geq R$ ). Знайти енергію та нормовану радіальну хвильову функцію основного стану електрона ( $l = 0$ ) у такій квантовій точці.

*Розв'язання:*

Для  $s$ -станів (орбітальне квантове число  $l = 0$ ) відцентрова енергія дорівнює нулю. Тоді радіальне рівняння Шредінгера для функції  $\chi(r) = rR(r)$  всередині квантової точки ( $r < R$ ) має такий самий вигляд, як для звичайної одновимірної потенціальної ями:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} = E\chi \implies \frac{d^2\chi}{dr^2} + k^2\chi = 0$$

де  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , а  $m$  — ефективна маса електрона в матеріалі квантової точки. Загальний розв'язок цього рівняння:

$$\chi(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$$

Повернемося до шуканої радіальної функції  $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ :

$$R(r) = A \frac{\sin(kr)}{r} + B \frac{\cos(kr)}{r}$$

Згідно з умовами регулярності, хвильова функція має бути скінченною в центрі квантової точки ( $r \rightarrow 0$ ). Оскільки  $\frac{\cos(kr)}{r} \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow 0$ , ми повинні покласти  $B = 0$ . Функція  $\frac{\sin(kr)}{r}$  у нулі прямує до скінченного значення  $k$ , тому вона задовольняє умову. Отже:

$$R(r) = A \frac{\sin(kr)}{r}$$

На межі квантової точки ( $r = R$ ) хвильова функція має перетворюватися на нуль, оскільки стінки нескінченно високі:

$$R(R) = A \frac{\sin(kR)}{R} = 0 \implies \sin(kR) = 0$$

Звідси отримуємо умову просторового квантування:  $kR = n\pi$ , де  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Для основного стану ( $n = 1$ ):  $k = \frac{\pi}{R}$ . Підставляючи це у вираз для  $k$ , знаходимо енергію основного стану:

$$\frac{\sqrt{2mE_1}}{\hbar} = \frac{\pi}{R} \implies E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2}$$

Цей результат (енергія розмірного квантування) фундаментально пояснює, чому ширина забороненої зони та колір світіння квантових точок залежать від їхнього геометричного радіуса.

Тепер знайдемо нормувальну константу  $A$  з умови  $\int_0^R |R(r)|^2 r^2 dr = 1$ :

$$\int_0^R \left( A \frac{\sin(kr)}{r} \right)^2 r^2 dr = A^2 \int_0^R \sin^2 \left( \frac{\pi r}{R} \right) dr = 1$$

Використаємо тригонометричну формулу  $\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos(2\alpha)}{2}$ :

$$A^2 \frac{1}{2} \int_0^R \left( 1 - \cos \left( \frac{2\pi r}{R} \right) \right) dr = A^2 \frac{R}{2} = 1 \implies A = \sqrt{\frac{2}{R}}$$

**Відповідь:**  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2}$ ,  $R_{10}(r) = \sqrt{\frac{2}{R}} \frac{\sin(\pi r/R)}{r}$ .

### Задача 3. Нормування хвильової функції атома водню

Довести, що хвильова функція основного стану атома водню  $\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$  є правильно нормованою.

*Розв'язання:*

Умова нормування для тривимірного простору в сферичних координатах має вигляд:

$$\iiint |\Psi|^2 dV = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr = 1$$

Оскільки задана функція не залежить від кутів  $\theta$  та  $\varphi$ , інтегрування по кутовій частині просто дає повний тілесний кут  $4\pi$ :

$$4\pi \int_0^\infty |\Psi(r)|^2 r^2 dr = 1$$

Підставимо хвильову функцію:

$$4\pi \int_0^\infty \left( \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \right)^2 r^2 dr = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

Для обчислення інтеграла виду  $\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx$  можна скористатися відомою табличною формулою (гамма-функцією), результат якої дорівнює  $\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ . У нашому випадку  $n = 2$ , а  $\alpha = 2/a_0$ :

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = \frac{2!}{(2/a_0)^3} = \frac{2}{8/a_0^3} = \frac{2a_0^3}{8} = \frac{a_0^3}{4}$$

Підставимо обчислений інтеграл у вихідний вираз:

$$\frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{a_0^3}{4} = 1$$

Отже, повна ймовірність знайти електрон у всьому просторі дійсно дорівнює одиниці. Хвильова функція нормована абсолютно коректно.

#### Задача 4. Жорсткий сферичний ротатор

Двоатомну молекулу можна наближено розглядати як жорсткий сферичний ротатор — систему з двох атомів масами  $m_1$  та  $m_2$ , відстань між якими жорстко фіксована і дорівнює  $r_0$ . Знайти власні значення енергії такої системи та кратність виродження енергетичних рівнів.

*Розв'язання:*

Задачу про рух двох взаємодіючих частинок можна звести до задачі про рух однієї частинки з *зведеною масою*  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ , яка обертається навколо нерухомого центру мас на фіксованій відстані  $r_0$ . Момент інерції такої системи відносно центру мас дорівнює  $I = \mu r_0^2$ .

Оскільки радіус обертання жорстко зафіксований ( $r = r_0 = \text{const}$ ), радіальна частина кінетичної енергії дорівнює нулю. Потенціальна енергія також відсутня ( $U = 0$ ). Гамільтоніан системи містить лише кутову частину оператора Лапласа, яка з точністю до множника збігається з оператором квадрата орбітального моменту  $\hat{L}^2$ :

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

Стационарне рівняння Шредінгера для ротатора набуває вигляду:

$$\frac{\hat{L}^2}{2I} Y(\theta, \varphi) = E Y(\theta, \varphi)$$

Як відомо з теорії моменту кількості руху, власними функціями оператора  $\hat{L}^2$  є сферичні функції  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , а його власні значення дорівнюють  $\hbar^2 l(l+1)$ , де  $l = 0, 1, 2, \dots$  — орбітальне (в даному випадку *обертальне*) квантове число. Підставимо це в рівняння Шредінгера:

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} Y_{lm}(\theta, \varphi) = E_l Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Звідси знаходимо квантовані значення енергії жорсткого ротатора:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = B l(l+1)$$

де  $B = \frac{\hbar^2}{2I}$  — так звана обертальна стала молекули.

Енергія  $E_l$  залежить лише від квантового числа  $l$  і зовсім не залежить від магнітного квантового числа  $m$ , яке визначає проекцію моменту на вісь  $z$ . Оскільки для заданого  $l$  число  $m$  може набувати  $2l + 1$  значень ( $m = -l, -l + 1, \dots, l$ ), кожному енергетичному рівню  $E_l$  відповідає  $2l + 1$  різних хвильових функцій  $Y_{lm}$ . Отже, кратність виродження кожного обертового рівня дорівнює  $g_l = 2l + 1$ .

**Відповідь:**  $E_l = \frac{\hbar^2}{2I}l(l + 1)$ ; кратність виродження  $g_l = 2l + 1$ .

### Задача 5. Обертальний спектр двоатомної молекули

Визначити частоти випромінювання при квантових переходах між сусідніми обертовими рівнями жорсткого ротатора (згідно з правилом відбору, можливі лише переходи зі зміною обертового квантового числа на одиницю:  $\Delta l = \pm 1$ ). Показати, що спектр є еквідистантним (відстані між сусідніми спектральними лініями однакові).

*Розв'язання:*

Розглянемо перехід молекули з вищого обертового рівня  $l$  на нижчий рівень  $l - 1$ . Згідно з правилом частот Бора, енергія випроміненого фотона дорівнює різниці енергій цих станів:

$$\hbar\omega_l = E_l - E_{l-1}$$

Підставимо вираз для енергії ротатора  $E_l = Bl(l + 1)$ , отриманий у попередній задачі:

$$\hbar\omega_l = Bl(l + 1) - B(l - 1)l = Bl[(l + 1) - (l - 1)] = Bl[2] = 2Bl$$

Звідси частота спектральної лінії, що відповідає переходу  $l \rightarrow l - 1$ :

$$\omega_l = \frac{2B}{\hbar}l, \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

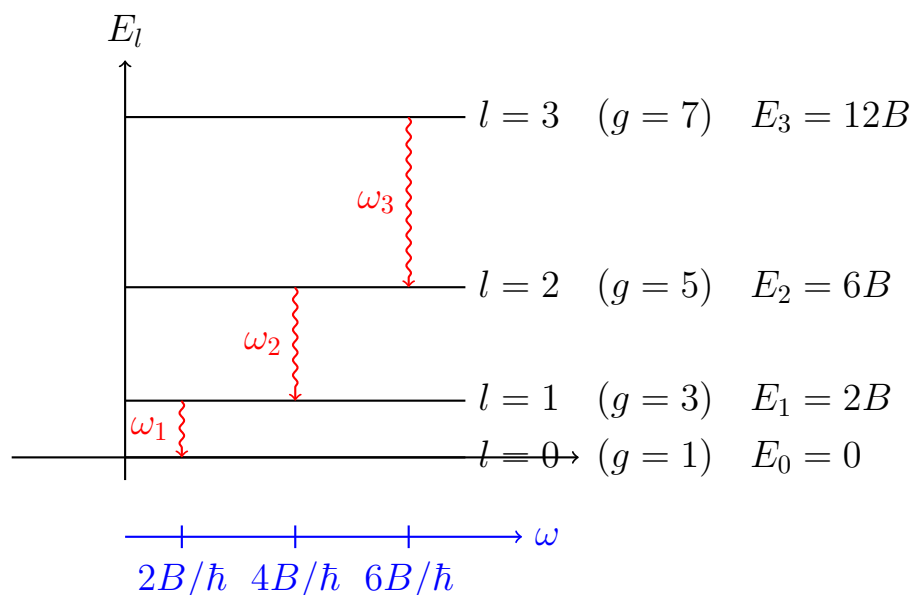


Рис. 6.2. Енергетичні рівні жорсткого сферичного ротатора та формування еквідистантного обертального спектра

Знайдемо відстань між двома сусідніми спектральними лініями (наприклад, між лінією від переходу  $l + 1 \rightarrow l$  та лінією від переходу  $l \rightarrow l - 1$ ):

$$\Delta\omega = \omega_{l+1} - \omega_l = \frac{2B}{\hbar}(l + 1) - \frac{2B}{\hbar}l = \frac{2B}{\hbar} = \text{const}$$

Оскільки  $\Delta\omega$  не залежить від квантового числа  $l$ , відстань між усіма лініями в обертальному спектрі є однаковою. Такий спектр називається еквідистантним (див. Рис. 6.2). Вимірюючи відстань між лініями на досліді, можна визначити обертальну сталу  $B$ , а з неї — момент інерції  $I$  та точну відстань між атомами в молекулі  $r_0$ .

**Відповідь:**  $\omega_l = \frac{2B}{\hbar}l$ . Відстань між лініями постійна:  $\Delta\omega = \frac{2B}{\hbar}$ .

#### Задача 4. Середня відстань електрона від ядра

Для основного стану атома водню (1s-стан) обчислити середню відстань електрона від ядра  $\langle r \rangle$  та порівняти її з найбільш імовірною відстанню  $r_{max} = a_0$ .

*Розв'язання:*

Середнє значення радіуса обчислюється як математичне сподівання:

$$\langle r \rangle = \iiint r |\Psi_{100}|^2 dV = \int_0^\infty r W(r) dr$$

де  $W(r) = 4\pi r^2 |\Psi_{100}|^2$  — радіальна густина ймовірності. Підставимо хвильову функцію основного стану  $\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$ :

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r \left( 4\pi r^2 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \right) dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr$$

Скористаємося табличним інтегралом  $\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ . У нашому випадку  $n = 3$ ,  $\alpha = 2/a_0$ :

$$\int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr = \frac{3!}{(2/a_0)^4} = \frac{6}{16/a_0^4} = \frac{3}{8} a_0^4$$

Підставимо це значення у вираз для середнього радіуса:

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{3}{8} a_0^4 = \frac{3}{2} a_0 = 1.5 a_0$$

Як бачимо, середня відстань  $\langle r \rangle = 1.5 a_0$  є більшою за найбільш імовірну відстань  $r_{max} = a_0$  (радіус першої орбіти Бора). Це пояснюється тим, що розподіл густини ймовірності  $W(r)$  є асиметричним: він має довгий експоненційний

"хвіст" у бік великих відстаней  $r \rightarrow \infty$ , який і зміщує середнє значення вправо від максимуму (див. Рис. 6.1).

**Відповідь:**  $\langle r \rangle = 1.5a_0$ .

### Задача 5. Густина струму ймовірності в атомі водню

Стан електрона в атомі водню описується хвильовою функцією  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi}$ , де  $m$  — магнітне квантове число. Визначити вектор густини струму ймовірності  $\vec{j}$  для цього стану. Обговорити фізичний зміст результату для  $s$ -станів ( $m = 0$ ) та станів з  $m \neq 0$ .

*Розв'язання:*

Вектор густини струму ймовірності визначається загальною формулою:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_e}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$$

(Тут  $m_e$  — маса електрона, щоб не плутати з магнітним квантовим числом  $m$ ). Для зручності позначимо дійсну частину хвильової функції (яка залежить лише від  $r$  та  $\theta$ ) як  $f(r, \theta) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)$ . Тоді хвильова функція та її комплексно-спряжена мають вигляд:

$$\Psi = f(r, \theta)e^{im\varphi}, \quad \Psi^* = f(r, \theta)e^{-im\varphi}$$

Оператор набла  $\nabla$  у сферичних координатах:

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Оскільки при диференціюванні по  $r$  та  $\theta$  експоненти залишаються незмінними, доданки з  $\vec{e}_r$  та  $\vec{e}_\theta$  у виразі  $(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$  взаємно знищуються (адже  $\Psi\Psi^* = f^2$  у всіх членах без похідної по  $\varphi$ , і різниця дасть нуль). Єдиний відмінний від нуля внесок дає диференціювання по куту  $\varphi$ :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = f(r, \theta)(im)e^{im\varphi} = im\Psi$$

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial\varphi} = f(r, \theta)(-im)e^{-im\varphi} = -im\Psi^*$$

Знайдемо азимутальну компоненту струму  $j_\varphi$ :

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2m_e} \frac{1}{r \sin \theta} \left( \Psi \frac{\partial\Psi^*}{\partial\varphi} - \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} \right) = \frac{i\hbar}{2m_e} \frac{1}{r \sin \theta} (\Psi(-im\Psi^*) - \Psi^*(im\Psi))$$

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2m_e} \frac{1}{r \sin \theta} (-2im|\Psi|^2) = \frac{\hbar m}{m_e r \sin \theta} |\Psi|^2$$

Отже, вектор густини струму ймовірності має лише одну ненульову компоненту — азимутальну:

$$\vec{j} = \frac{\hbar m}{m_e r \sin \theta} |\Psi|^2 \vec{e}_\varphi$$

### Аналіз результату:

- 1) Якщо  $m = 0$  (наприклад, для всіх s-станів), то  $\vec{j} = 0$ . Ймовірнісний струм відсутній, електронна "хмара" є статичною і нікуди не обертається.
- 2) Якщо  $m \neq 0$ , виникає кільцевий струм ймовірності, спрямований вздовж паралелей сферичної системи координат (навколо осі  $z$ ). Це відповідає наявності у електрона ненульової проекції орбітального моменту  $L_z = \hbar m$ . Саме цей неперервний мікроскопічний струм генерує орбітальний магнітний момент атома.

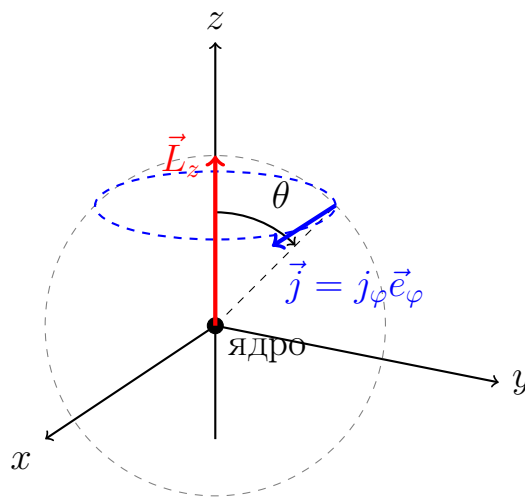


Рис. 6.2. Кільцевий струм ймовірності  $\vec{j}$  в атомі водню для станів з  $m > 0$ . Струм тече навколо осі  $z$  і створює орбітальний магнітний момент.

**Відповідь:**  $\vec{j} = \frac{\hbar m}{m_e r \sin \theta} |\Psi|^2 \vec{e}_\varphi$ .

## Тема 7. Теорія збурень

### Короткі теоретичні відомості та формули

#### Нестационарна та стаціонарна теорія збурень

Теорія збурень застосовується, коли гамільтоніан системи можна подати у вигляді  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , де  $\hat{H}_0$  — "незбурений" гамільтоніан, розв'язок якого відомий ( $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ ), а  $\hat{V}$  — мале збурення.

#### Збурення за відсутності виродження

Якщо енергетичний рівень  $E_n^{(0)}$  не є виродженим, то поправки першого та другого порядків до енергії визначаються формулами:

- Поправка першого порядку:  $E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dV$  (середнє значення збурення у незбуреному стані).
- Поправка другого порядку:  $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$ , де  $V_{nm} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dV$  — матричні елементи збурення.

#### Варіаційний метод

Використовується для оцінки енергії основного стану  $E_0$ . Згідно з варіаційним принципом, середня енергія в будь-якому пробному стані  $\psi_{trial}$  завжди не менша за істинну енергію основного стану:

$$E_{trial} = \frac{\int \psi_{trial}^* \hat{H} \psi_{trial} dV}{\int \psi_{trial}^* \psi_{trial} dV} \geq E_0$$

Мінімізуючи  $E_{trial}$  за параметрами пробної функції, можна отримати наближення до  $E_0$ .

### Приклади розв'язаних задач

#### Задача 1. Ангармонічний осцилятор

Лінійний гармонічний осцилятор масою  $m$  та частотою  $\omega$  перебуває під дією малого збурення виду  $\hat{V} = \gamma x^4$  (ангармонічна поправка). Знайти поправку першого порядку до енергії основного стану.

*Розв'язання:*

Поправка першого порядку до енергії основного стану ( $n = 0$ ) дорівнює середньому значенню оператора збурення:

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | \gamma x^4 | \psi_0 \rangle = \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 |\psi_0(x)|^2 dx$$

Хвильова функція основного стану осцилятора:  $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ . По-значимо  $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ . Тоді:

$$E_0^{(1)} = \gamma \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx$$

Використаємо табличний інтеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n \alpha^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ . Для  $2n = 4 \implies n = 2$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3!!}{2^2 \alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{3}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

Підставимо це значення:

$$E_0^{(1)} = \gamma \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{3}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{3\gamma}{4\alpha^2} = \frac{3\gamma\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

**Відповідь:**  $E_0^{(1)} = \frac{3\gamma\hbar^2}{4m^2\omega^2}$ .

## Задача 2. Ефект Штарка в атомі водню (основний стан)

Атом водню помістили в однорідне електричне поле напруженістю  $\mathcal{E}$ , спрямоване вздовж осі  $z$ . Обчислити поправку першого порядку до енергії основного стану (1s-стан).

*Розв'язання:*

Оператор збурення в електричному полі має вигляд:  $\hat{V} = -e\mathcal{E}z = -e\mathcal{E}r \cos\theta$ . Поправка першого порядку:

$$E_1^{(1)} = \int \Psi_{100}^* (-e\mathcal{E}r \cos\theta) \Psi_{100} dV$$

Оскільки  $\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$  є сферично симетричною функцією, підінтегральний вираз містить  $\cos\theta$ . Інтеграл по кутовій частині:

$$\int_0^\pi \cos\theta \sin\theta d\theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin(2\theta) d\theta = 0$$

Отже, поправка першого порядку до енергії основного стану атома водню в електричному полі дорівнює нулю. Це означає, що атом у 1s-стані не має постійного дипольного моменту. Ефект Штарка в основному стані є квадратичним (пропорційним  $\mathcal{E}^2$ ) і визначається лише поправкою другого порядку.

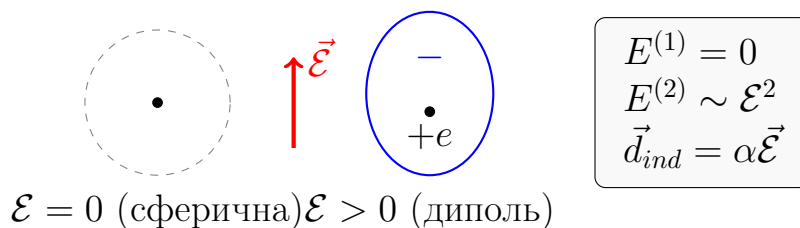


Рис. 8.1. Поляризація атома водню в основному стані зовнішнім електричним полем

Відповідь:  $E_1^{(1)} = 0$ .

### Задача 3. Збурення в нескінченній потенціальній ямі

Частинка знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною  $a$ . У центрі ями діє збурення у вигляді дельта-функції:  $\hat{V} = \alpha\delta(x - a/2)$ . Знайти поправку першого порядку до рівнів енергії  $E_n$ .

Розв'язання:

Незбурені хвильові функції:  $\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ . Поправка першого порядку:

$$E_n^{(1)} = \int_0^a \psi_n^{(0)*}(x) \alpha \delta(x - a/2) \psi_n^{(0)}(x) dx = \alpha |\psi_n^{(0)}(a/2)|^2$$

Підставимо значення функції в точці  $x = a/2$ :

$$E_n^{(1)} = \alpha \cdot \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi \cdot a/2}{a}\right) = \frac{2\alpha}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

Проаналізуємо результат залежно від  $n$ :

1. Якщо  $n$  — парне ( $n = 2, 4, \dots$ ), то  $\sin(n\pi/2) = 0$ . Поправка  $E_n^{(1)} = 0$ . Це тому, що парні стани мають вузол (нульове значення) в центрі ями, і "не відчують" збурення, локалізованого там.
2. Якщо  $n$  — непарне ( $n = 1, 3, \dots$ ), то  $\sin^2(n\pi/2) = 1$ . Поправка  $E_n^{(1)} = \frac{2\alpha}{a}$ .

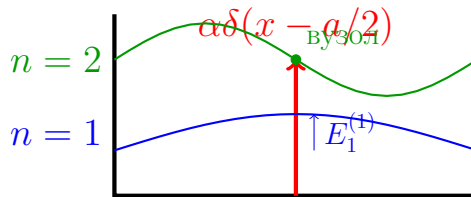


Рис. 8.2. Вплив центрального збурення на рівні енергії в ямі: непарні рівні зсуваються, парні — ні.

Відповідь:  $E_n^{(1)} = \frac{2\alpha}{a}$  для непарних  $n$  та  $E_n^{(1)} = 0$  для парних  $n$ .

### Задача 4. Нормальний ефект Зеемана (орбітальний внесок)

Електрон в атомі водню перебуває у стані з орбітальним квантовим числом  $l = 1$ . Атом помістили в слабе однорідне магнітне поле  $\vec{B} = B\hat{z}$ . Знайти поправку першого порядку до енергії рівнів та величину розщеплення між підрівнями (нормальний ефект Зеемана). Розв'язання:

Оператор збурення від взаємодії орбітального магнітного моменту з полем має вигляд:

$$\hat{V} = -\hat{\vec{\mu}}_L \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \hat{L}_z B = \mu_B B \frac{\hat{L}_z}{\hbar},$$

де  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  — магнетон Бора. Оскільки незбурені стани  $|l, m_l\rangle$  є власними функціями оператора  $\hat{L}_z$  ( $\hat{L}_z |l, m_l\rangle = m_l \hbar |l, m_l\rangle$ ), поправка першого порядку за теорією збурень є просто:

$$E_{m_l}^{(1)} = \langle l, m_l | \hat{V} | l, m_l \rangle = \mu_B B m_l.$$

Для  $l = 1$  можливі значення  $m_l = -1, 0, +1$ . Отже, енергії підрівнів:

$$E = E_0^{(0)} + \mu_B B m_l.$$

Рівень розщеплюється на три підрівні: -  $m_l = -1$ :  $E = E_0 - \mu_B B$  -  $m_l = 0$ :  $E = E_0$  -  $m_l = +1$ :  $E = E_0 + \mu_B B$  Інтервал між сусідніми підрівнями дорівнює  $\mu_B B$ .

**Відповідь:** Три підрівні з енергіями  $E_0 - \mu_B B$ ,  $E_0$ ,  $E_0 + \mu_B B$ ; інтервал розщеплення  $\Delta E = \mu_B B$ .

### Задача 5. Аномальний ефект Зеемана (з урахуванням спіну)

Електронний стан атома з орбітальним моментом  $l = 1$  та спіном  $s = 1/2$  помістили в слабе магнітне поле  $\vec{B} = B \hat{z}$ . Знайти поправки першого порядку до енергії всіх можливих станів  $|l, m_l, s, m_s\rangle$  (аномальний ефект Зеемана).

*Розв'язання:*

Повний оператор збурення враховує як орбітальний, так і спіновий магнітний момент:

$$\hat{V} = \mu_B B \left( \frac{\hat{L}_z}{\hbar} + g_s \frac{\hat{S}_z}{\hbar} \right), \quad g_s = 2.$$

Оскільки в нерелятивістському наближенні стани  $|m_l, m_s\rangle$  є власними для  $\hat{L}_z$  та  $\hat{S}_z$ , поправка першого порядку:

$$E^{(1)} = \mu_B B (m_l + 2m_s).$$

Можливі комбінації ( $m_l = -1, 0, 1$ ;  $m_s = \pm 1/2$ ) дають 6 значень: -  $m_l = 1$ ,  $m_s = +1/2$ :  $+1 + 1 = +2 \rightarrow E = E_0 + 2\mu_B B$  -  $m_l = 1$ ,  $m_s = -1/2$ :  $+1 - 1 = 0 \rightarrow E = E_0$  -  $m_l = 0$ ,  $m_s = +1/2$ :  $0 + 1 = +1 \rightarrow E = E_0 + \mu_B B$  -  $m_l = 0$ ,  $m_s = -1/2$ :  $0 - 1 = -1 \rightarrow E = E_0 - \mu_B B$  -  $m_l = -1$ ,  $m_s = +1/2$ :  $-1 + 1 = 0 \rightarrow E = E_0$  -  $m_l = -1$ ,  $m_s = -1/2$ :  $-1 - 1 = -2 \rightarrow E = E_0 - 2\mu_B B$

Рівень розщеплюється на 5 підрівнів (деякі збігаються за енергією).

**Відповідь:** Підрівні з енергіями  $E_0 \pm 2\mu_B B$ ,  $E_0 \pm \mu_B B$ ,  $E_0$  (кратність 2 для  $E_0$ ).

**Задача 6. Розщеплення спектральних ліній за ефектом Зеемана**

Перехід між станами  $l = 1 \rightarrow l = 0$  в атомі водню відбувається у магнітному полі  $\vec{B} = B\hat{z}$ . Враховуючи правило відбору  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ , визначити кількість та частоти спектральних ліній (нормальний ефект Зеемана). *Розв'язання:* Рівень  $l = 1$  розщеплюється на три підрівні ( $m_l = -1, 0, +1$ ), рівень  $l = 0$  не розщеплюється ( $m_l = 0$ ). Можливі переходи ( $\Delta m_l = 0, \pm 1$ ): -  $\sigma^+$  ( $\Delta m_l = +1$ ): з  $m_l = 0$  верхнього рівня  $\rightarrow$  один фотон -  $\pi$  ( $\Delta m_l = 0$ ): з  $m_l = 0 \rightarrow$  один фотон -  $\sigma^-$  ( $\Delta m_l = -1$ ): з  $m_l = -1 \rightarrow$  один фотон. Енергія фотона змінюється на  $\pm \mu_B B$  відносно незбуреної частоти  $\omega_0$ :

$$\omega = \omega_0 \pm \frac{\mu_B B}{\hbar}, \quad \omega = \omega_0.$$

Отже, замість однієї лінії спостерігаємо три лінії (тріплет).

**Відповідь:** Три спектральні лінії з частотами  $\omega_0, \omega_0 \pm \frac{\mu_B B}{\hbar}$ .

## Задачі та завдання для самостійного розв'язання

1. Показати, що хвильова функція  $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$  задовольняє рівняння Шредінгера для вільної частинки. Знайти зв'язок між  $\omega$  та  $k$ .
2. Довести, що густина ймовірності  $\rho = |\psi|^2$  задовольняє рівняння неперервності.
3. Знайти середні значення координати та імпульсу для хвильової функції плоскої хвилі.
4. Перевірити, що оператор імпульсу є ермітовим.
5. Обчислити комутатор операторів координати та імпульсу.
6. Використовуючи принцип невизначеності Гейзенберга, оцінити мінімальну енергію частинки у потенціальній ямі ширини  $a$ .
7. Нормувати хвильову функцію  $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ .
8. Знайти середнє значення координати для нормованої функції Гауса.
9. Визначити середнє значення імпульсу для функції  $\psi(x) = Ae^{ikx}$ .
10. Довести, що оператор Гамільтона є ермітовим.
11. Знайти власні функції та власні значення енергії частинки у нескінченній потенціальній ямі ширини  $a$ .
12. Обчислити середню енергію частинки у першому збудженому стані нескінченної потенціальної ями.
13. Визначити ймовірність знайти частинку у половині ями для основного стану.
14. Знайти енергії перших трьох станів електрона в ямі ширини 1 нм.
15. Обчислити середнє значення координати в основному стані потенціальної ями.
16. Дослідити виродження енергетичних рівнів у двовимірній нескінченній потенціальній ямі.
17. Знайти енергетичний спектр частинки у прямокутній потенціальній ямі.
18. Дослідити тунелювання частинки через прямокутний потенціальний бар'єр.
19. Вивести коефіцієнт проходження через потенціальний бар'єр.

20. Знайти коефіцієнт відбиття для частинки, що падає на потенціальний бар'єр.
21. Визначити умови існування зв'язаних станів у скінченній потенціальній ямі.
22. Оцінити кількість зв'язаних станів у потенціальній ямі заданої глибини.
23. Знайти енергетичні рівні гармонічного осцилятора.
24. Записати хвильову функцію основного стану гармонічного осцилятора.
25. Обчислити середню координату та імпульс у основному стані осцилятора.
26. Показати, що енергія нульових коливань дорівнює  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ .
27. Знайти оператори народження та знищення для гармонічного осцилятора.
28. Обчислити комутатор операторів народження і знищення.
29. Визначити середнє значення енергії у стані  $n$ .
30. Обчислити дисперсію координати для основного стану осцилятора.
31. Записати стаціонарне рівняння Шредінгера для атома водню.
32. Знайти енергетичний спектр атома водню.
33. Обчислити радіус Бора.
34. Визначити середню відстань електрона від ядра у основному стані.
35. Знайти ймовірність знаходження електрона у сферичному шарі.
36. Пояснити фізичний зміст квантових чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m$ .
37. Визначити можливі значення моменту імпульсу.
38. Обчислити власні значення оператора  $L^2$ .
39. Показати, що сферичні гармоніки є власними функціями оператора моменту імпульсу.
40. Знайти виродження рівнів у атомі водню.
41. Визначити енергію фотона при переході між рівнями  $n = 2$  та  $n = 1$ .
42. Обчислити довжину хвилі випромінювання при переході  $3 \rightarrow 2$  у атомі водню.

43. Розглянути вплив слабкого електричного поля на енергетичні рівні атома водню (ефект Штарка).
44. Описати розщеплення рівнів у магнітному полі (ефект Зеемана).
45. Знайти можливі значення проекції моменту імпульсу.
46. Пояснити фізичний зміст хвильової функції.
47. Обчислити густину ймовірності для заданої хвильової функції.
48. Знайти час еволюції суперпозиції двох стаціонарних станів.
49. Дослідити інтерференцію двох квантових станів.
50. Пояснити фізичний зміст принципу суперпозиції у квантовій механіці.

## Список використаних джерел

1. Бойчук В. І. Квантова механіка – Дрогобич: Редакційно-видавничий відділ ДДПУ ім. І. Франка, 2016. – 368 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник. 4-те вид., доп. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. – 872 с.
3. Глауберман А. Ю. Квантова механіка. – Львів, 1962.
4. Давидов О. С. Квантова механіка : підручник. – К. : Електронне видання, 2013.
5. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки. – Київ : Либідь, 2002. – 392 с.
6. Landau L. D., Lifshitz E. M. Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Course of Theoretical Physics. Vol. 3. – Pergamon Press, 1991. – 674 p.
7. Апостолов С. С., Єзерська О. В. Основи квантової механіки. Теорія та практичні завдання : навч.-метод. посіб. – Харків : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2021. – 140 с.
8. Гречко Л. Г., Єжов С. М., Сугаков В. О. Збірник задач із теоретичної фізики. Квантова механіка. – К. : Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2013. – 215 с.
9. Basdevant J.-L., Dalibard J. Quantum Mechanics. – Berlin : Springer-Verlag, 2002. – 512 p.
10. Flügge S. Practical Quantum Mechanics. – Berlin : Springer-Verlag, 1994. – 648 p.
11. Ткачук В. М. Фундаментальні проблеми квантової механіки. – Львів : ЛНУ ім. І. Франка, 2011. – 143 с.
12. Blinder S. M. Introduction to Quantum Mechanics. 2nd ed. – Elsevier, 2022. – 416 p.
13. House J. E. Fundamentals of Quantum Mechanics. – Elsevier, 2018. – 362 p.