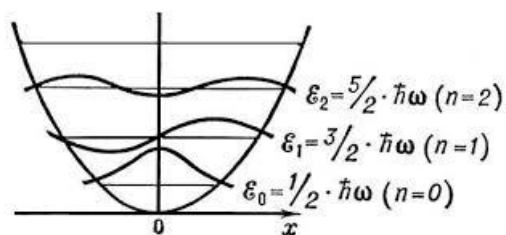


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД**  
**“УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”**  
**Фізичний факультет**

**М.І. Карбованець, В.Ю. Лазур, Є.А. Нодь**

**ПРАКТИКУМ З КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ**



**Ужгород – 2022**

Карбованець М.І., Лазур В.Ю., Нодь Є.А. Практикум з квантової механіки. – Ужгород: Видавництво УжНУ “Говерла”, 2022. – 52 с.

**Рецензент:**

доктор фізико-математичних наук, професор, старший науковий співробітник відділу електронних процесів і елементарних взаємодій ІЕФ НАН України

Гайсак М.І.

**Відповідальний за випуск:**

доктор фізико-математичних наук, професор,

декан фізичного факультету

Лазур В.Ю.

Практикум створено на базі частини лекційних курсів “Основи квантової фізики” та “Квантова механіка”, що читаються студентам фізичного факультету УжНУ спеціальностей “Телекомунікації та радіотехніка”, “Прикладна фізика і наноматеріали”, “Мікро- та наносистемна техніка”, “Фізика та астрономія” та “Середня освіта. Фізика”. Він містить ряд основних ідей і методів квантової механіки в обсязі, достатньому для їх подальшого застосування в курсах теоретичної фізики та спецкурсах. Практикум містить завдання різного рівня складності, приведено детальні розв’язки запропонованих задач.

Практикум розраховано на студентів фізико-математичних та інженерно-технічних спеціальностей університетів.

*Рекомендовано до друку методичною комісією фізичного факультету  
(протокол № 4 від 14.12.2021 року).*

## Зміст

	Стор.
В С Т У П.....	4
1. Короткі відомості про математичний апарат квантової механіки .....	6
2. Вправи на закріплення розуміння формалізму КМ.....	13
2.1. Комутаційні співвідношення .....	13
2.2. Імовірності результатів вимірювань, середні значення та дисперсії фізичних величин .....	14
3. Найпростіші задачі квантової механіки.....	19
3.1. Стаціонарні стани.....	19
3.2. Проходження через потенціальні бар'єри.....	31
3.3. Наближені методи розв'язання квантово-механічних задач.....	47
ЛІТЕРАТУРА.....	51

## ВСТУП

Основна мета даного навчально-методичного посібника – допомогти читачеві оволодіти математичним формалізмом квантової механіки (КМ). Наразі цей формалізм успішно зарекомендував себе у розв’язанні задач як фундаментального, так і прикладного характеру. Відмітимо особливості КМ як наукової дисципліни. Створена на початку ХХ ст., КМ досягла блискучих успіхів у поясненні фізичних явищ та властивостей матерії, обумовлених закономірностями мікросвіту (спектри атомів, молекул, кристалів, явища надплинності та надпровідності, особливості теплоємності речовини, тощо). Більш того – на основі КМ створені нові матеріали з наперед заданими властивостями і нові прилади – прилади квантової електроніки. Тобто, КМ наразі фактично стала інженерною дисципліною. Проте, більш глибокий – світоглядний – рівень КМ все ще представляє собою хвилюючу таємницю. Серед провідних фізиків сучасності досі, після численних дискусій протягом ХХ ст., немає єдиної точки зору щодо тлумачення та інтерпретації певних гносеологічних аспектів та базових понять КМ. Особливо це стосується процесу квантового вимірювання, для описання якого вживаються такі поняття, як “редукція хвильового пакету”, “колапс хвильової функції”, тощо. Слід відмітити, що переважній частині фізиків відсутність розуміння вказаних методологічних аспектів до останнього часу не заважала: їм було достатньо розуміння КМ на “інструментальному рівні”, тобто вміння застосовувати формалізм КМ до розв’язання конкретних задач. Але в останнє десятиліття інтенсивно почали розвиватися нові, фантастично цікаві напрямки КМ: квантові комп’ютери, квантова телепортація, квантова криптографія тощо. З’ясувалося, що для успішного просування за цими напрямками недостатньо обмежуватися лише “інструментальним рівнем” розуміння КМ – необхідно виробити більш глибоке “інтерпретаційне” розуміння цієї надзвичайно цікавої дисципліни. Автори даного посібника, однак, вважають за потрібне попередити зацікавленого читача: над філософськими, “інтерпретаційними” поняттями КМ можна починати працювати лише після засвоєння її “інструментального рівня”. Інакше подібні спроби у кращому випадку пе-

ретворюються у “словесну еквілібристику”, а у гіршому – ведуть до профанації науки.

Отже, ми наполегливо рекомендуємо читачеві: на певний час відкласти інтригуючі і цікаві “інтерпретаційні” питання КМ і зайнятися, можливо менш цікавою, але необхідною працею – оволодінням математичним апаратом КМ та його застосуванням до розв’язання конкретних практичних задач. Даний посібник якраз для цього і призначений. У першому розділі посібника конспективно наводяться основні відомості з математичного формалізму КМ (для більш ґрунтовного вивчення вказаних питань читач може звернутися до праць [1-5]). Вправи для закріплення розуміння цього формалізму наведені у розділі 2. Основна частина посібника, розділ 3, присвячена розв’язанню вибраних практичних задач КМ.

## 1. Короткі відомості про математичний апарат квантової механіки

Математичний апарат КМ докорінним чином відрізняється від математичного формалізму класичної механіки. Це обумовлено суттєвою відмінністю поведінки мікрооб'єктів (яка досліджується в КМ) порівняно з рухом класичних частинок. Відмітимо наступні три основні відмінності: 1) принципово імовірнісний характер поведінки мікрооб'єктів (на відміну від однозначного – лапласівського – детермінізму класичної механіки); 2) співвідношення невизначеностей фізичних величин (ФВ): є такі пари ФВ, для яких не існує фізичних станів, в яких вони одночасно мали б точні значення (нижче це твердження буде обговорюватися детальніше, а зараз нагадаємо відомий приклад: пара “координата  $X$  та проекція імпульсу  $P_X$ ” – їх дисперсії  $\overline{\Delta X^2}$  і  $\overline{\Delta P_X^2}$  пов'язані співвідношенням невизначеності Гайзенберга:  $\overline{\Delta X^2} \cdot \overline{\Delta P_X^2} \geq \hbar^2 / 4$ ); 3) дискретність можливих значень певних фізичних величин, наприклад, моменту імпульсу. Ці три особливості обумовили специфічність математичного формалізму КМ, необхідність використання нових понять, не притаманних класичній фізиці. Двома такими основними поняттями КМ є хвильова функція і оператор фізичної величини. Два вихідні твердження КМ. Твердження I: Стан фізичної системи задається хвильовою функцією. Твердження II: У КМ фізичним величинам співставляються оператори. Нагадаємо основні положення, які розкривають зміст цих тверджень більш детально.

Хвильова функція (ХФ)  $\Psi$  в загальному випадку є комплексно-значною функцією деякого набору змінних  $\{\xi\}$  і часу  $t$ :  $\Psi = \Psi(\xi, t)$ . Наприклад, у випадку однієї безспінової частинки набір  $\{\xi\}$  є сукупністю її координат  $(x, y, z)$  (або деяких криволінійних координат  $(q_1, q_2, q_3)$ ). Суть твердження I полягає в наступному: якщо задана хвильова функція  $\Psi$  системи, то ми можемо визначити амплітуду імовірності результату вимірювання будь-якої фізичної величини (див. нижче). Така інформація про фізичну систему з точки зору квантової механіки є максимально повною. Саме цей зміст вкладають у твердження, що  $\Psi$  визначає стан фізичної системи. Нагадаємо три основні вимоги до ХФ, які впливають з її ролі:

вона має бути 1) однозначною, 2) неперервною і 3) обмеженою, точніше – квадратично інтегрованою (про можливі винятки йтиметься нижче). Сукупність ХФ, які описують всі можливі стани даної фізичної системи, утворюють лінійний простір (простір Гільберта). Це означає, що виконується принцип суперпозиції: якщо фізична система може знаходитися в станах  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ , то вона може знаходитися і у стані  $\Psi$ , що є їх суперпозицією:

$$\Psi = \sum_i C_i \Psi_i, \quad (1.1)$$

де коефіцієнти  $C_i$  - комплексні числа.

Серед усіх наборів  $\{\Psi_i\}$  особливий інтерес представляють так звані повні набори (базиси), за якими можна розкласти будь-яку ХФ. Надалі будемо використовувати лише ортонормовані базиси  $\{\varphi_k\}$ :

$$\int \varphi_k^* \varphi_n d\xi = \delta_{kn}; \quad \delta_{kn} = \begin{cases} 1, & k = n, \\ 0, & k \neq n. \end{cases} \quad (1.2)$$

Такими базисами є сукупності власних функцій операторів  $\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{L}, \dots, \hat{N}, \dots$  фізичних величин  $A, B, \dots, L, \dots, N, \dots$ . Нагадаємо, що власною функцією оператора  $\hat{A}$  називається функція, яка задовільняє рівнянню

$$\hat{A} \varphi_n = A_n \varphi_n. \quad (1.3)$$

Числа  $A_n$  у (1.3) називаються власними значеннями оператора  $\hat{A}$ , а їх сукупність – спектром оператора  $\hat{A}$ . При вимірюванні величини  $A$  одержують ті і тільки ті значення, які належать спектру  $\{A_n\}$ . Це ілюструє один із інструментальних аспектів твердження II.

Знання набору власних функцій  $\{\varphi_k\}$  дає можливість визначити імовірність того чи іншого результату вимірювання величини  $A$  у стані  $\Psi$ :

$$P_{A=A_n}^{(\Psi)} = \left| \int \varphi_n^* \Psi d\xi \right|^2, \quad (1.4)$$

(вираз під знаком модуля – амплітуда вказаної імовірності). Формула (1.4) ілюструє один із інструментальних аспектів твердження I, а також розкриває фізичний зміст власних функцій. А саме, як впливає із (1.3) і (1.4), якщо система знахо-

диться в одному із власних станів  $\varphi_n$ , то при вимірюванні величини  $A$  ми із сто- відсотковою імовірністю одержимо значення  $A = A_n$ ,  $P_{A=A_n}^{(\varphi_n)} = 1$  (а інші  $P_{A=A_k}^{(\varphi_n)} = 0$ ,  $k \neq n$ ).

Яким же чином у квантовій механіці конструюють оператори фізичних ве- личин? Перш за все нагадаємо дві обмежувальні умови, що стосуються вказаних операторів. А саме, оператори фізичних величин повинні бути лінійними та ермі- товими. Оператор  $\hat{A}$  називається лінійним, якщо образом суперпозиції є суперпо- зиція образів:

$$\hat{A}(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \dots) = C_1\hat{A}\Psi_1 + C_2\hat{A}\Psi_2 + \dots \quad (1.5)$$

Лінійність операторів фізичних величин необхідна для забезпечення принципу суперпозиції. У свою чергу, ермітовість операторів потрібна для забезпечення дійсності власних значень оператора. Нагадаємо, що оператор називається ермі- товим (або самоспряженим), якщо для довільних функцій  $\Psi_1$  та  $\Psi_2$  виконується співвідношення:

$$\int \Psi_2^* \hat{A} \Psi_1 d\xi = \int \Psi_1 \hat{A}^* \Psi_2^* d\xi. \quad (1.6)$$

Сформулюємо наступний принцип, який допоможе в конструюванні опера- торів фізичних величин: співвідношення між операторами фізичних величин у квантовій механіці має бути таким же, як співвідношення між цими величинами у класичній фізиці (існують деякі винятки з цього принципу, на яких ми тут не бу- демо зупинятися). Наприклад, момент імпульсу у класичній механіці визначаєть- ся, як  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ , тому оператор моменту імпульсу у квантовій механіці має вигляд  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ . Оскільки переважна більшість фізичних величин є функціями коорди- нат та імпульсу, то нам залишилося відповісти на останнє питання: який явний вид операторів координати  $\hat{r} = \hat{r}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  та імпульсу  $\hat{p} = \hat{p}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ ? Відповідь – цей вид має бути таким, щоб дисперсії відповідних проекцій координати та ім- пульсу задовольняли співвідношенням невизначеності Гайзенберга. А це буде то-



ді і тільки тоді, коли у групі операторів  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$  виконуються наступні комутаційні співвідношення:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (1.7)$$

а всі інші комутатори дорівнюють нулю.

Нагадаємо, що комутатором  $[\hat{A}, \hat{B}]$  операторів  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  називається вираз:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.8)$$

Можна довести наступне твердження (див. розділ 2, вправа ): якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  не комутують, тобто  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ , то

$$\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \bar{C}^2 / 4. \quad (1.9)$$

Співвідношення (1.9) ілюструє другий інструментальний аспект твердження II: оператори, як не комутативні у загальному випадку об'єкти, потрібні в КМ в силу відмінності 2). Нагадаємо, що дисперсією  $\overline{(\Delta A)^2}$  величини  $A$  називається вираз

$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{(A - \bar{A})^2}$ , де  $A$  - випадкове значення величини  $A$ , а  $\bar{A}$  - середнє значення.

Можна довести, що середнє значення  $\bar{A}$  величини  $A$  у стані  $\varphi$  визначається наступним співвідношенням (див. вправу 8):  $\bar{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi d\xi$ .

Таким чином, залишилося підібрати такі оператори координат та імпульсів, які б задовольняли співвідношенням (1.7). У координатному представленні розв'язок (1.7) має вид (пропонуємо читачеві переконатися у цьому самостійно):

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x, & \hat{y} &= y, & \hat{z} &= z, \\ \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, & \hat{p}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, & \hat{p}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

або у векторній формі

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (1.11)$$

Тепер легко побудувати оператор кінетичної енергії

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \quad (1.12)$$

та оператор моменту імпульсу:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla}) = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}. \quad (1.13)$$

Звідси для операторів проекцій моменту імпульсу одержимо наступні вирази:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Запроваджені вище оператори  $\hat{r}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ ,  $\hat{p}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ ,  $\hat{T}$  та  $\hat{L}(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$  будемо називати стандартними операторами. Комутативні співвідношення у цій сукупності операторів, а також розв'язки рівнянь на власні значення і власні функції цих операторів – відомі; вивчення вказаних питань пропонуємо зробити читачеві самостійно (диви вправи у наступному розділі).

Що ж стосується виду основного оператора КМ – оператора Гамільтона (або гамільтоніана)  $\hat{H}$ , який є оператором повної енергії  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ , то він не має раз і назавжди заданого вигляду: незмінною залишається лише оператор кінетичної енергії  $\hat{T}$ , а вид оператора потенціальної енергії  $\hat{V}$  залежить від конкретної задачі. Тому розв'язання певної квантово-механічної задачі розпочинається із моделювання гамільтоніана  $\hat{H}$ , фактично з моделювання  $\hat{V}$ . Часто такий вибір доводиться робити з урахуванням двох протидіючих обставин: з одного боку, аби модель була якомога точнішою, в  $\hat{V}$  потрібно включати найсуттєвіші взаємодії, а з іншого боку вираз  $\hat{V}$  має бути не занадто складним з огляду на можливість ефективного розв'язання відповідних рівнянь.

Наведемо приклади операторів Гамільтона деяких простих систем, з яких починається знайомство з квантовою механікою:

1) атом водню:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - k \frac{e^2}{r}; \text{ в системі СІ } k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Н} \cdot \text{Кг} \cdot \text{м}^2}{\text{м}^2}; \quad (1.15)$$

2) лінійний гармонічний осцилятор з власною частотою  $\omega$  і масою  $m$ :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}; \quad (1.16)$$

3) атом гелію:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - ke^2 \left( \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} \right) + k \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (1.17)$$

Рівняння на власні значення і власні функції оператора  $\hat{H}$  у КМ називається стаціонарним рівнянням Шредінгера; воно має вид:

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n. \quad (1.18)$$

Переважає більшість теоретичних досліджень у КМ базується саме на рівнянні (1.18). У розділі 3 читачеві пропонується для розв'язання декілька практичних задач КМ, які фактично зводяться до розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера (1.18).

Зазначимо, що власні функції оператора Гамільтона  $\varphi_n$  є координатними частинами так званих стаціонарних станів

$$\Psi_n(\xi, t) = \varphi_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (1.19)$$

в яких система може знаходитися лише у випадках, коли гамільтоніан  $\hat{H}$  явно не залежить від часу  $t$ ,  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ , тобто квантова система знаходиться у стаціонарних умовах. У загальному випадку еволюція системи описується (часовим) рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (1.20)$$

Неважко переконатися, що у випадку  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$  хвильова функція (1.19) є розв'язком рівняння (1.20), якщо координатна функція  $\varphi_n$  задовольняє стаціонар-

не рівняння Шредінгера (1.18). Якщо ж  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \neq 0$ , то стаціонарних розв'язків рівняння (1.20) не існує. У цьому випадку рівняння (1.20) описує еволюцію системи у часі. Таким чином, рівняння Шредінгера відображає більш загальну форму детермінізму – квантовий детермінізм: якщо відомий стан системи у початковий момент часу  $t_0$

$$\Psi(t_0) = \Psi_0, \quad (1.21)$$

то, розв'язуючи рівняння (1.20) з початковою умовою (1.21), можна знайти стан  $\Psi(t)$  системи у будь-який наступний момент часу  $t$ .

## 2. Вправи на закріплення розуміння формалізму КМ

### 2.1. Комутаційні співвідношення

**Вправа 1.** Визначити комутатор  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ .

Розв'язання. Для  $\forall \psi = \psi(x, \dots)$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right) = i\hbar \psi \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (2.1)$$

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

**Вправа 2.** Виписати всі можливі комутатори в сукупності операторів  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ .

Відповідь:

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_k] = [\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0; [\hat{r}_i, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{ik}. \quad (2.2)$$

Тут  $i, k = (x, y, z)$  - позначення індексів операторів проекцій радіус-вектора  $\hat{r}$  та імпульсу  $\hat{p}$ .

**Вправа 3.** Визначити комутатор операторів  $\hat{r}$  та кінетичної енергії  $\hat{T}$ .

Розв'язання. Використовуючи вираз (1.12), запишемо

$$[\hat{r}, \hat{T}] = \frac{1}{2m} \{ [\hat{x}, \hat{p}_x^2] \vec{i} + [\hat{y}, \hat{p}_y^2] \vec{j} + [\hat{z}, \hat{p}_z^2] \vec{k} \}. \quad (2.3)$$

Визначимо комутатори у фігурній дужці, використовуючи (2.1):

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_i^2] = \hat{r}_i \hat{p}_i \hat{p}_i - \hat{p}_i \hat{p}_i \hat{r}_i = (\hat{p}_i \hat{r}_i + i\hbar) \hat{p}_i - (\hat{p}_i \hat{r}_i - i\hbar) \hat{p}_i = 2i\hbar \hat{p}_i, \quad i = x, y, z. \quad (2.4)$$

Підставивши (2.4) у вираз (2.3), одержимо

$$[\hat{r}, \hat{T}] = \frac{i\hbar}{m} \{ [\hat{x}, \hat{p}_x] \vec{i} + [\hat{y}, \hat{p}_y] \vec{j} + [\hat{z}, \hat{p}_z] \vec{k} \} = i\hbar \frac{\hat{p}}{m}. \quad (2.5)$$

Відповідь:  $[\hat{r}, \hat{T}] = i\hbar \frac{\hat{p}}{m}$ .

**Вправа 4.** Встановити комутаційні співвідношення між операторами проєкцій моменту імпульсу  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ .

Розв'язання. Обчислимо як приклад комутатор (інші два комутатори обчислюються аналогічно)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y)(\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) - (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z)(\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) = \\ &= \underline{\hat{y} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_x} - \hat{y} \hat{p}_z \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \hat{z} \hat{p}_x + \hat{z} \hat{p}_y \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{y} \hat{p}_z + \underline{\hat{z} \hat{p}_x \hat{z} \hat{p}_y} + \hat{x} \hat{p}_z \hat{y} \hat{p}_z - \underline{\hat{x} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_y} = \\ &= \hat{p}_z \hat{z} \underbrace{(\hat{y} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_y)}_{-\hat{L}_z} - \hat{z} \hat{p}_z \underbrace{(\hat{p}_x \hat{y} - \hat{x} \hat{p}_y)}_{-\hat{L}_z} = \hat{L}_z [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

Відповідь:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad (2.6)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, \quad (2.7)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x. \quad (2.8)$$

**Вправа 5.** Довести, що кожний з операторів  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  комутує з  $\hat{L}^2$ , тобто

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0.$$

2.2. Імовірності результатів вимірювань,  
середні значення та дисперсії фізичних величин

**Вправа 6.** Показати, що з умови нормування хвильової функції

$$\int |\Psi(\xi)|^2 d\xi = 1 \quad (2.9)$$

та умови ортонормування власних функцій ермітового оператора

$$\hat{A} \varphi_n = A_n \varphi_n, \quad (2.10)$$

а саме

$$\int \varphi_n^* \varphi_k d\xi = \delta_{nk} \quad (2.11)$$

впливає, що набір  $\{\varphi_n\}$  є повним, тобто при розкладанні  $\forall \Psi$  у ряд

$$\Psi = \sum_n C_n \varphi_n \quad (2.12)$$

виконується співвідношення

$$\sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (2.13)$$

При цьому  $|C_n|^2$  визначає імовірність того, що при вимірюванні величини  $A$  над системою, що перебуває в стані  $\Psi$ , ми одержимо значення  $A = A_n$ . Цю імовірність позначатимемо

$$P_{A=A_n}^{(\Psi)} = |C_n|^2. \quad (2.14)$$

**Вправа 7.** Використовуючи (2.11) і (2.12), довести, що

$$C_n = \int \varphi_n^* \Psi d\xi. \quad (2.15)$$

Співвідношення (2.15) дозволяє представити вираз (2.14) у вигляді:

$$P_{A=A_n}^{(\Psi)} = \left| \int \varphi_n^* \Psi d\xi \right|^2. \quad (2.16)$$

**Вправа 8.** Показати, що середнє значення величини  $A$  у стані  $\Psi$ ,  $\bar{A}$  визначається формулою

$$\bar{A}_\Psi = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\xi. \quad (2.17)$$

*Вказівка.* Для доведення (2.17) підставити розклад (2.12) в (2.17) і, використовуючи (2.10), (2.11) і (2.14), одержати співвідношення

$$\bar{A}_\Psi = \sum_n P_{A=A_n}^{(\Psi)} A_n, \quad (2.18)$$

що є стандартним визначенням середнього значення (надалі індекс " $\Psi$ " в середньому значенні не випикуємо).

**Вправа 9.** Визначити середнє значення потенціальної енергії електрона в основному стані атома водню

$$\varphi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad (2.19)$$

де  $a = \frac{\hbar^2}{kme^2} \approx 0,53 \text{ \AA}$  - радіус Бора.

Розв'язання. За означенням середнього значення

$$\bar{V} = \int \varphi_{1s}^* V \varphi_{1s} d^3 r. \quad (2.20)$$

Оскільки  $V = -k \frac{e^2}{r}$ ;  $k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{н} \cdot \text{кз}^2}{\text{м}^2}$ ;  $d^3 r = r^2 dr d\Omega$ , то

$$\bar{V} = -\frac{4\pi k e^2}{\pi a^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a} dr = -k \frac{e^2}{a}. \quad (2.21)$$

Відповідь:  $\bar{V} = -k \frac{e^2}{a}$ .

**Вправа 10.** Визначити середнє значення кінетичної енергії електрона в основному стані атома водню.

Розв'язання. Перш за все запишемо оператор  $\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2$ , де

$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ . Тоді

$$\bar{T} = \int \varphi_{1s}^* \hat{T} \varphi_{1s} d^3 r = -\frac{4\pi \hbar^2}{\pi a^3 2m} \int_0^\infty e^{-r/a} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} e^{-r/a} \right) dr,$$

звідки одержимо:

$$\bar{T} = \frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2} = \frac{ke^2}{2a}. \quad (2.22)$$

Із (2.21) і (2.22) видно, що  $\bar{V} = -2\bar{T}$  - аналог відомої теореми віріала в класичній механіці.

Відповідь:  $\bar{T} = \frac{ke^2}{2a}$ .



**Вправа 11.** Визначити дисперсію координати  $\overline{(\Delta x)^2}$  в основному стані лінійного гармонічного осцилятора:

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

Розв'язання. Маємо:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \overline{x^2}, \text{ оскільки } \bar{x} = 0.$$

Тому

$$\overline{(\Delta x)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0^*(x) x^2 \varphi_0(x) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (2.23)$$

Відповідь:  $\overline{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}.$

**Вправа 12.** Визначити дисперсію імпульсу  $\overline{(\Delta p)^2}$  в основному стані лінійного гармонічного осцилятора.

Розв'язання. Маємо:

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p - \bar{p})^2} = \overline{p^2} - (\bar{p})^2 = \overline{p^2}, \text{ оскільки } \bar{p} = 0.$$

Тому

$$\overline{(\Delta p)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0^*(x) \hat{p}^2 \varphi_0(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx = \frac{\hbar m\omega}{2}. \quad (2.24)$$

Відповідь:  $\overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar m\omega}{2}.$

**Висновки** із вправ (2.11) і (2.12):

1) У розглянутому випадку співвідношення Гайзенберга мінімізується. Дійсно, з (2.23) та (2.24) слідує, що

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.25)$$

Такі стани в КМ називаються когерентними.

2) Середні значення потенціальної  $\bar{V}$  та кінетичної  $\bar{T}$  лінійного гармонічного осцилятора дорівнюють одне одному і рівні половині енергії основного стану

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \text{ Дійсно, } \bar{V} = \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{E_0}{2}, \text{ а також } \bar{T} = \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{E_0}{2}.$$

### 3. Найпростіші задачі квантової механіки

#### 3.1. Стаціонарні стани

##### Задача №1

#### Квантова частинка в полі одновимірної потенціальної ями з необмежено високими стінками

Насамперед розглянемо допоміжну одновимірну задачу про стани частинки в полі потенціального бар'єра нескінченної висоти. Оператор Гамільтона у нашому випадку має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \quad (1)$$

де

$$\hat{V}(x) = \begin{cases} \infty, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Вимагається визначити хвильову функцію  $\varphi(x)$  частинки на границі потенціального бар'єру при  $x = 0$ :  $\varphi(x)|_{x=0} = \varphi(0)$ .

Для знаходження розв'язку рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \hat{V}(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (2)$$

вважатимемо, що при  $x > 0$  потенціальна енергія скінчена і  $V(x > 0) \gg E$ . Загальний розв'язок рівняння (2), скінчений в усій області  $x > 0$ , визначається формулою

$$\varphi(x > 0) \sim e^{-\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}x}. \quad (3)$$

Зазначимо, що в (3) ми відкинули розв'язок  $\sim e^{+\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}x}$ , оскільки він розбіжний при  $x \rightarrow +\infty$ . Виконаємо тепер в (3) подвійний граничний перехід:  $x \rightarrow 0$  і  $V \rightarrow +\infty$ . На границі бар'єру (при  $x = 0$ ) маємо:

$$\frac{\varphi'(0)}{\varphi(0)} = -\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}} \xrightarrow{x \rightarrow 0} -\infty. \quad (4)$$

Співвідношення (4) виконується лише за умови, що

$$\varphi(0) = 0, \quad (5)$$

а  $\varphi'(0)$  - скінчена величина.

Розглянемо тепер задачу про рух частинки в полі одновимірної потенціальної ями з необмежено високими стінками, коли гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (6)$$

де

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > a \\ 0, & 0 < x < a. \end{cases}$$

Як слідує з наведеного вище прикладу, за вказаних умов частинка поза потенціальною ямою знаходитися не може. Тому її хвильова функція  $\psi(x)$  при  $x \leq 0$  і  $x \geq a$  дорівнює нулю. Всередині ями, при  $0 < x < a$ , стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (7)$$

з наступними граничними умовами (див. формулу (5)):

$$\psi(0) = \psi(a) = 0. \quad (8)$$

Загальний розв'язок рівняння (7):

$$\psi(x) = C \sin(kx + \delta), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (9)$$

Сталі  $k$  та  $\delta$  визначаються із граничних умов (8):

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \delta = 0, \quad (10)$$

$$\psi(a) = 0 \Rightarrow k_n = n \frac{\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11)$$

а стала  $C$  - із умови нормування:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (12)$$

Отже, стаціонарні стани в необмежено глибокій ямі реалізуються при таких дискретних значеннях енергії:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

Відповідні хвильові функції рівні

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right). \quad (14)$$

З'ясуємо фізичний зміст умови (11). Оскільки хвильове число  $k$  визначає довжину хвилі  $\lambda = 2\pi/k$ , то з (11) випливає, що  $a = n\lambda_n/2$ , тобто в стаціонарних станах на ширині ями укладається ціле число півхвиль де Бройля. У цьому полягає відмінність від необмеженого простору, в якому стаціонарні стани реалізуються при довільному значенні  $\lambda$ .

## Задача №2

### Квантова частинка в полі одновимірної прямокутної потенціальної ями скінченної глибини

Розглянемо рух частинки маси  $m$  в полі з потенціальною енергією  $U(x)$  (див. рис. 3.1):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < \frac{a}{2}, \\ -U_0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \\ 0, & x > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (1)$$

Таке ідеалізоване поле часто використовується для описання руху частинок в реальних полях з великим градієнтом в окремих малих областях простору (наприклад, рух електронів в металевій пластинці малих розмірів).

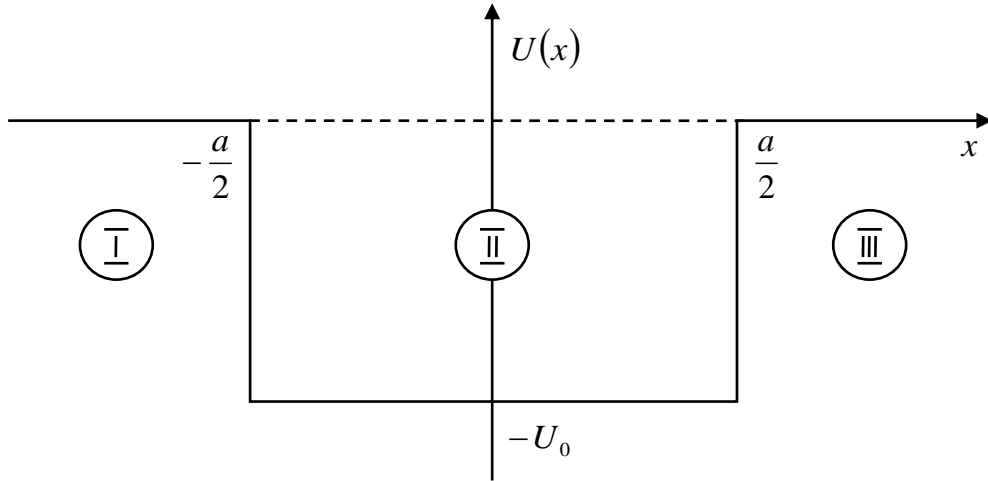


Рис. 3.1. Одновимірна прямокутна потенціальна яма

Оскільки гамільтоніан частинки в полі (1)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (2)$$

є парним, тобто  $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$ , то він комутує з оператором парності  $\hat{P}$ :  $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ .

Нагадаємо, що за визначенням оператора  $\hat{P}$ :

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (3)$$

Тому стаціонарні стани можна класифікувати за певним значенням парності. По-заяк із (3) випливає, що  $\hat{P}^2\psi(x) = \psi(x)$ , то власними значеннями оператора  $\hat{P}$  є:  $P_+ = +1$  і  $P_- = -1$ . Отже, набір стаціонарних станів розбивається на два класи: а) парні стани  $\psi^+(x)$ , для яких  $\psi^+(-x) = \psi^+(x)$  і б) непарні стани  $\psi^-(x)$ , для яких  $\psi^-(-x) = -\psi^-(x)$ .

Знайдемо стаціонарні розв'язки рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (4)$$

в інтервалі енергій  $-U_0 < E \leq 0$ .

Позначимо:

$$k^2 = \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + U_0)} \quad (5)$$

$$k'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \geq 0 \Rightarrow k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}. \quad (6)$$

Тоді рівняння Шредінгера в областях I, II і III (див. рис. 3.1) запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2\psi_{I,III}}{dx^2} = k'^2\psi_{I,III}, \quad x \leq -\frac{a}{2}, x \geq \frac{a}{2} \quad (7)$$

і

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -k^2\psi_{II}, \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}. \quad (8)$$

Загальні розв'язки рівнянь (7), (8):

$$\psi_I(x) = Ae^{k'x} + A_1e^{-k'x}, \quad (9)$$

$$\psi_{II}(x) = B\cos(kx) + C\sin(kx), \quad (10)$$

$$\psi_{III}(x) = De^{-k'x} + D_1e^{k'x}. \quad (11)$$

Із умови квадратичної інтегрованості хвильової функції  $\psi(x)$  одержимо:

$$A_1 = D_1 = 0. \quad (12)$$

Далі, для парних станів  $\psi^+(-x) = \psi^+(x)$ :  $C = 0$ ,  $D = A$ ; а для непарних станів  $\psi^-(-x) = -\psi^-(x)$ :  $D = 0$ ,  $D = -A$ .

Отже, для стаціонарних парних станів одержимо:

$$\psi^+(x) = \begin{cases} Ae^{k'x}, & x \leq -\frac{a}{2}, \\ B\cos(kx), & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \\ Ae^{-k'x}, & x \geq \frac{a}{2}, \end{cases} \quad (13)$$

а для непарних стаціонарних станів –

$$\psi^-(x) = \begin{cases} De^{k'x}, & x \leq -\frac{a}{2}, \\ C\sin(kx), & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \\ De^{-k'x}, & x \geq \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (14)$$

Визначимо тепер значення енергії  $E$  стаціонарних станів (13) і (14) (через яку виражаються параметри  $k$  і  $k'$ ). Розглянемо спочатку парні стани (13). Використаємо умови неперервності функції  $\psi^+(x)$  та її похідної в точці  $x = -\frac{a}{2}$ :

$$Ae^{-\frac{k'a}{2}} = B\cos\left(\frac{ka}{2}\right), \quad (15)$$

$$k'Ae^{-\frac{k'a}{2}} = kB\sin\left(\frac{ka}{2}\right).$$

Система (15) має нетривіальні розв'язки тоді і тільки тоді, коли параметри  $k'$  і  $k$  задовольняють рівняння:

$$k' = k \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right). \quad (16)$$

Розглянемо тепер непарні стани. З умови неперервності функції  $\psi^-(x)$  та її похідної в точці  $x = -\frac{a}{2}$ :

$$De^{-\frac{k'a}{2}} = C\sin\left(\frac{ka}{2}\right), \quad (17)$$

$$-k'De^{-\frac{k'a}{2}} = kC\cos\left(\frac{ka}{2}\right).$$

Система (17) має нетривіальні розв'язки тоді і тільки тоді, коли параметри  $k'$  і  $k$  зв'язані рівнянням:

$$k' = -k \cdot \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right). \quad (18)$$

Із (5) і (6) випливає, що в обох випадках – парних і непарних станів - параметри  $k'$  і  $k$  зв'язані наступним рівнянням:

$$k^2 + k'^2 = Q^2, \quad Q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}. \quad (19)$$



На координатній площині  $(k, k')$  графіком рівняння (19) є коло, радіус  $Q$  якого пропорційний кореню квадратному із глибини ями  $U_0$ . Точки  $(k_n, k'_n)$ , які визначають енергії стаціонарних станів

$$E_n = -\frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - U_0 \quad (20)$$

розташовані в першій чверті ( $k > 0, k' \geq 0$ ) на перетині вказаного кола з графіками рівнянь: (16) – для парних станів і (18) – для непарних станів. Тому доцільно використати графічний метод для дослідження розв'язків трансцендентних рівнянь (16) і (19) - для парних станів та (18) і (19) - для непарних станів (див. рис. 3.2).

Висновки з представленого графічного аналізу:

- 1) в кожній смужці шириною  $\frac{\pi}{a}$  (по осі абсцис) знаходиться рівно один стаціонарний стан, причому парні стани знаходяться в непарних номерах  $k'_1, k'_3, k'_5, \dots$  (їм відповідають енергії  $E_1, E_3, E_5, \dots$ ), а непарні стани - в парних номерах  $k'_2, k'_4, k'_6, \dots$  (їм відповідають енергії  $E_2, E_4, E_6, \dots$ ). Завжди існує хоча б один перший стан – за будь-яких значень  $U_0$  та  $a$ ;
- 2) непарні стани існують лише за умови, що  $Q \geq \frac{\pi}{a}$ , тобто  $U_0 \geq \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{a} \right)^2$ ; при невиконанні цієї умови для частинки існує лише один дискретний стан, який є першим;
- 3) кількість  $N$  всіх стаціонарних станів (як парних, так і непарних) при заданих параметрах ями  $U_0$  та  $a$  визначається умовою:

$$N = \left[ \frac{a \sqrt{2mU_0}}{\pi \hbar} + 1 \right],$$

де символ  $[..]$  позначає цілу частину числа. Доведення цього твердження пропонується читачеві.

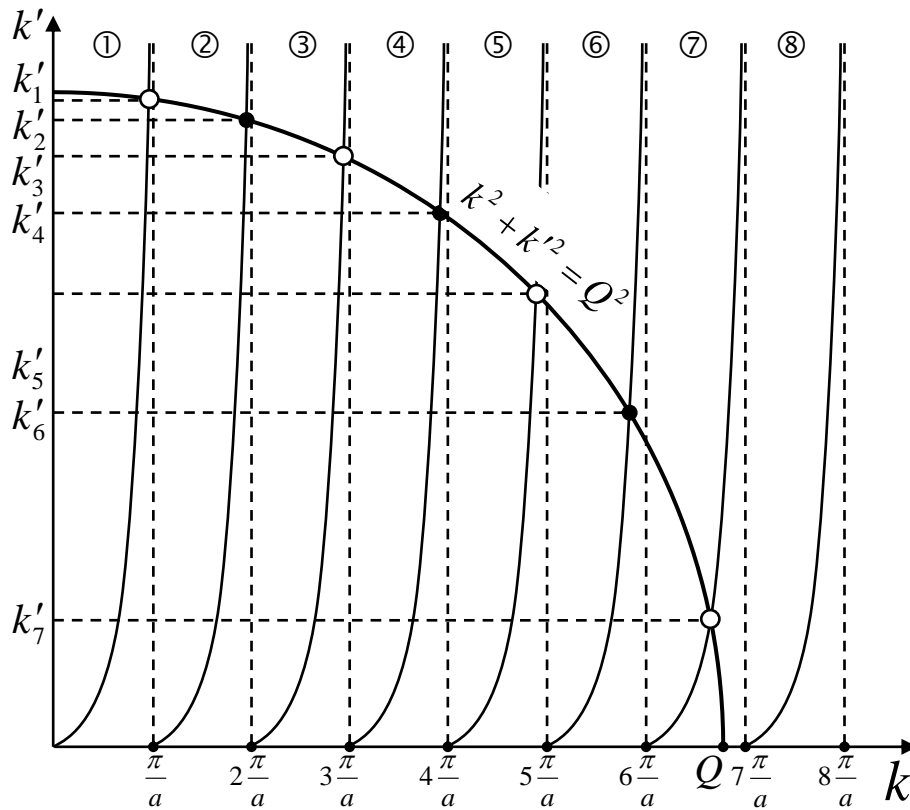


Рис. 3.2. Графічний аналіз рівнянь (16), (18)

Після визначення дискретних значень енергії  $E_n$  стаціонарних станів, в хвильових функціях цих станів (13) і (14) залишається по одному невизначеному коефіцієнту (в силу однорідності систем (15) і (17)). Цей останній коефіцієнт виражається з умови нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^{\pm}(x)|^2 dx = 1.$$

При  $E \leq U_0$  та  $E > 0$  стаціонарних станів не існує. Читачеві пропонується обґрунтувати це твердження самостійно.

### Задача №3

#### Квантова частинка в полі $\delta$ -подібної потенціальної ями

Розглянемо наступну модельну задачу: маємо одновимірну прямокутну потенціально яму з одним єдиним енергетичним рівнем (див. рис. 3.3). Необхідно визна-

чити умову прямування ширини цієї ями до нуля, а глибини – до нескінченості, при якій енергія рівня залишається незмінною.

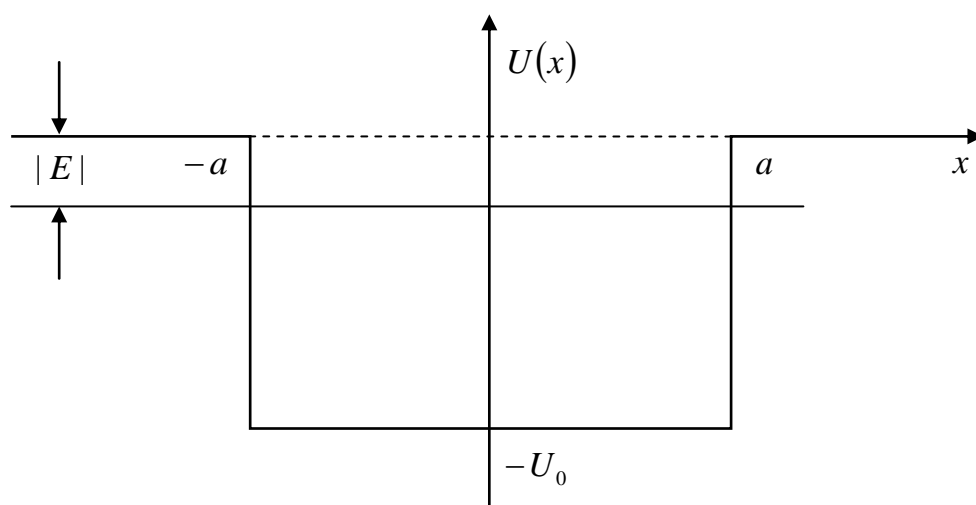


Рис. 3.3. Одновимірна прямокутна потенціальна яма з одним рівнем енергії

Із результатів задачі №2 випливає, що хвильова функція частинки, яка знаходиться на єдиному енергетичному рівні, що існує у ямі, як і хвильова функція будь-якого основного стану, не може мати вузлів, тобто має бути парною (відносно середини ями). Використовуючи формули (13) задачі №2, для хвильової функції частинки всередині ями  $x < |a|$  маємо:

$$\psi_{in}(x) = B \cos(kx), \quad (1)$$

де

$$k^2 = \frac{2m(E - U)}{\hbar^2} = \frac{2m(-|E| + U_0)}{\hbar^2},$$

а зовні ями справа ( $x > a$ ):

$$\psi_{out}(x) = A e^{-k'x}, \quad (2)$$

де

$$k'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}.$$

Прирівнюючи логарифмічні похідні функцій (1) і (2) на правій границі ями (при  $x = a$ ), одержимо:

$$\frac{\psi'_{in}(a)}{\psi_{in}(a)} = \frac{\psi'_{out}(a)}{\psi_{out}(a)} \Rightarrow k \cdot \operatorname{tg}(ka) = k'. \quad (3)$$

Спрямуємо тепер, як вимагається в умові задачі,  $U_0$  до нескінченності і  $a$  - до нуля. При цьому  $k$  буде прямувати до  $\infty$ . Але за умовою задачі  $k'$  має залишатися сталим, тому, як випливає з (3),  $\operatorname{tg}(ka)$  має прямувати до нуля. Це дозволяє нам замінити значення тангенса значенням його аргументу, тобто  $\operatorname{tg}(ka) \approx ka$ . У результаті із (3) знайдемо:

$$k^2 a = k', \quad (4)$$

або

$$\frac{2mU_0 a}{\hbar^2} = k'. \quad (5)$$

Таким чином, при прямуванні  $a$  до нуля, а  $U_0$  - до нескінченності їх добуток залишається сталим:

$$aU_0 = \operatorname{const}. \quad (6)$$

Якщо переписати вираз (6) у вигляді

$$2aU_0 = \operatorname{const}, \quad (7)$$

то відповідь на поставлене в умові задачі питання можна сформулювати так: для того, щоб енергія рівня залишається незмінною, необхідно прямувати ширину ями до нуля, а глибину – до нескінченності так, щоб “площа перерізу” ями залишалася сталою.

Знайдемо граничні умови для функцій  $\psi_{out}(x)$  за межами ями. Позначимо розв’язок зліва від ями  $\psi_\ell$ , а справа -  $\psi_r$  (зазначимо, що поза ямою може існувати довільний додатковий потенціал). Розв’язок всередині ями рівний

$$\psi_{in}(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx. \quad (8)$$

Гранична умова зліва від ями ( $x \rightarrow -a$ ) має вигляд:

$$\begin{aligned} \psi_\ell(-a) &= -C_1 \sin ka + C_2 \cos ka, \\ \psi'_\ell(-a) &= kC_1 \cos ka + kC_2 \sin ka. \end{aligned} \quad (9)$$

Розв'язавши систему рівнянь (9) відносно  $C_1$  і  $C_2$ , одержимо:

$$\begin{aligned} C_1 &= -\psi_\ell(-a)\sin ka + \psi'_\ell(-a)\frac{\cos ka}{k}, \\ C_2 &= \psi_\ell(-a)\cos ka + \psi'_\ell(-a)\frac{\sin ka}{k}. \end{aligned} \quad (10)$$

Гранична умова справа від ями ( $x \rightarrow +a$ ) має вигляд:

$$\begin{aligned} \psi_r(a) &= C_1 \sin ka + C_2 \cos ka, \\ \psi'_r(a) &= kC_1 \cos ka - kC_2 \sin ka. \end{aligned} \quad (11)$$

Підставляючи в (11) знайдені раніше значення  $C_1$  і  $C_2$  (10), виразимо  $\psi_r$  і  $\psi'_r$  через  $\psi_\ell$  і  $\psi'_\ell$ :

$$\begin{aligned} \psi_r(a) &= \psi_\ell(-a)\cos 2ka + \psi'_\ell(-a)\frac{\sin 2ka}{k}, \\ \psi'_r(a) &= -k\psi_\ell(-a)\sin 2ka + \psi'_\ell(-a)\cos 2ka. \end{aligned} \quad (12)$$

Перейдемо тепер до границі

$$a \rightarrow 0, \quad k^2 = \frac{k'}{a} \rightarrow \infty \quad (\text{тобто } ka = \sqrt{k'a} \rightarrow 0),$$

одержимо:

$$\psi_r(+0) = \psi_\ell(-0), \quad \psi'_r(+0) = -2k^2 a \psi_\ell(-0) + \psi'_\ell(-0),$$

або, замінюючи згідно (4)  $k^2 a$  на  $k'$ :

$$\begin{aligned} \psi_r(0) &= \psi_\ell(0), \\ \frac{\psi'_\ell(-0)}{\psi_\ell(-0)} - \frac{\psi'_r(+0)}{\psi_r(+0)} &= 2k', \quad \psi'_\ell(-0) - \psi'_r(+0) = 2k'\psi_\ell(0), \end{aligned} \quad (13)$$

де  $k'$  - єдина стала, яка характеризує яму і безпосередньо зв'язана з величиною енергії рівня у ній:

$$E = -\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}.$$

Умову (13) можна сформулювати у вигляді потенціалу, що має вид  $\delta$ -функції

$$U = -\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \delta(x).$$

Дійсно, інтегруючи рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U_1(x)\psi(x) - \frac{\hbar^2 k'}{m} \delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

( $U_1(x)$  - довільний, але гладкий додатковий потенціал) по малому інтервалу  $x$  в околі  $x=0$ , одержимо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d\psi(+0)}{dx} - \frac{d\psi(-0)}{dx} \right] - \frac{\hbar^2 k'}{m} \psi(0) = 0,$$

або

$$\frac{d\psi(+0)}{dx} - \frac{d\psi(-0)}{dx} = -2k'\psi(0),$$

що співпадає з умовою (13).

Зазначимо, що потенціал, який зображає прямокутну яму, при прямуванні  $U_0 \rightarrow \infty$  із забезпеченням при цьому умови (7) (рівність “площі перерізу” ями)

$$2aU_0 = \frac{\hbar^2 k'}{m} = const ,$$

прямує до  $\delta$ -функції з коефіцієнтом  $-\frac{\hbar^2 k'}{m}$ , що рівний за модулем площі прямокутника на рис. 3.3.

## 3.2. Проходження через потенціальні бар'єри

### Задача №4

#### Квантова частинка в полі одновимірного прямокутного потенціального бар'єру. Тунельний ефект та надбар'єрне відбивання

Розглянемо рух частинки в полі, де її потенціальна енергія  $U(x)$  має форму прямокутного бар'єра (рис. 3.4):

$$\hat{U}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a. \end{cases} \quad (1)$$

Потрібно визначити коефіцієнти відбивання і прозорості вказаного бар'єра.

Власні функції  $\psi(x)$  оператора Гамільтона

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x), \quad (2)$$

тобто розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

розіб'ємо на три гілки:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x), & x \leq 0 \\ \psi_2(x), & 0 \leq x \leq a \\ \psi_3(x), & x \geq a \end{cases} \quad (4)$$

Стаціонарні рівняння Шредінгера для  $\psi_{1,2,3}$  мають вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} &= -k_0^2\psi_{1,3}, \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} &= -k^2\psi_2, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{де } k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}.$$

Загальні розв'язки рівняння (5) визначаються виразами

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_1 e^{ik_0 x} + A_2 e^{-ik_0 x}, \\
\psi_2(x) &= B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \\
\psi_3(x) &= C_1 e^{ik_0 x} + C_2 e^{-ik_0 x}.
\end{aligned}
\tag{6}$$

Сформулюємо тепер постановку задачі про відбивання та проходження частинки через потенціальний бар'єр, у випадку, коли до взаємодії з бар'єром вона рухається у додатному напрямку осі  $x$ . У цьому випадку вираз  $A_1 e^{ik_0 x}$  описує падаючі частинки, а вираз  $A_2 e^{-ik_0 x}$  - відбиті. Отже,  $\psi_1 = \psi_{nad} + \psi_{vidb}$ ;  $\psi_{nad} = A_1 e^{ik_0 x}$ ;  $\psi_{vidb} = A_2 e^{-ik_0 x}$ . У третій області не може бути частинок, які б рухалися у зворотному напрямку, тому слід покласти  $C_2 = 0$ . Вираз  $C_1 e^{ik_0 x}$  описує частинки, що пройшли потенціальний бар'єр, тобто  $\psi_3(x) = \psi_{np}(x) = C_1 e^{ik_0 x}$ .

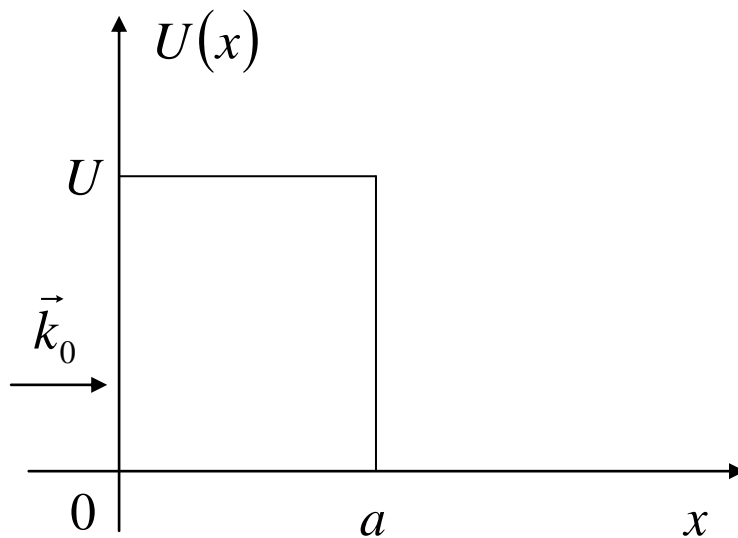


Рис. 3.4. Прямокутний потенціальний бар'єр

Введемо тепер експериментально вимірювані технічні коефіцієнти – відбивання:

$$R = \frac{j_{vidb}}{j_{nad}} \tag{7}$$

і прозорості бар'єра:

$$D = \frac{j_{np}}{j_{nad}}, \tag{8}$$



де  $j_{nad}$ ,  $j_{vidb}$ ,  $j_{np}$  - величини густин потоків відповідно падаючих частинок, відбитих частинок і частинок, що пройшли бар'єр. Використовуючи формулу, що виражає густину потоку через хвильову функцію

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (9)$$

одержимо

$$j_{nad} = \frac{\hbar k_0}{m} |A_1|^2, \quad j_{vidb} = \frac{\hbar k_0}{m} |A_2|^2, \quad j_{np} = \frac{\hbar k_0}{m} |C_1|^2. \quad (10)$$

Підставивши (10) у (7) і (8), одержимо:

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2; \quad D = \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2. \quad (11)$$

Використаємо тепер умови неперервності хвильової функції  $\psi(x)$  та її похідної  $\psi'(x)$  в точках  $x=0$  і  $x=a$ :

$$\begin{aligned} \psi_1(0) = \psi_2(0) &\Rightarrow A_1 + A_2 = B_1 + B_2, \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) &\Rightarrow k_0(A_1 - A_2) = k(B_1 - B_2), \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) &\Rightarrow B_1 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = C_1 e^{ik_0 a}, \\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a) &\Rightarrow k(B_1 e^{ika} - B_2 e^{-ika}) = k_0 C_1 e^{ik_0 a}. \end{aligned} \quad (12)$$

Система (12) – це система 4-х лінійних рівнянь для 5-и невідомих  $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1$ .

Але, оскільки для визначення коефіцієнтів відбивання  $R$  і прозорості  $D$  нам потр-

рібно знати лише відношення  $\frac{A_2}{A_1}$  і  $\frac{C_1}{A_1}$ , то поділивши рівняння системи (12) на  $A_1$ ,

одержимо 4-и рівняння для 4-х невідомих

$$A = \frac{A_2}{A_1}, \quad B = \frac{B_1}{A_1}, \quad \tilde{B} = \frac{B_2}{A_1}, \quad C = \frac{C_1}{A_1}; \quad R = |A|^2; \quad D = |C|^2:$$

$$\begin{aligned} 1 + A &= B + \tilde{B}, \\ \gamma(1 - A) &= B - \tilde{B}, \\ B e^{ika} + \tilde{B} e^{-ika} &= C e^{ik_0 a}, \\ \frac{1}{\gamma} (B e^{ika} - \tilde{B} e^{-ika}) &= C e^{ik_0 a}, \quad \gamma = \frac{k_0}{k}. \end{aligned} \quad (13)$$

Виразимо  $B$  і  $\tilde{B}$  через  $A$  з перших двох рівнянь системи (13):

$$B = \frac{A(1-\gamma)+1+\gamma}{2}, \quad \tilde{B} = \frac{A(1+\gamma)+1-\gamma}{2}. \quad (14)$$

Підставивши (14) в останні два рівняння в (13), одержимо рівняння для визначення  $A$ :

$$\begin{aligned} & A[(1-\gamma)e^{ika} + (1+\gamma)e^{-ika}] + (1+\gamma)e^{ika} + (1-\gamma)e^{-ika} = \\ & = \frac{1}{\gamma} \left\{ A[(1-\gamma)e^{ika} - (1+\gamma)e^{-ika}] + (1+\gamma)e^{ika} - (1-\gamma)e^{-ika} \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Із (15) маємо:

$$A = \frac{i(\gamma^2 - 1)\sin(ka)}{2\gamma \cos(ka) - i(\gamma^2 + 1)\sin(ka)}. \quad (16)$$

Тепер знаходимо  $C$ :

$$C = \frac{e^{-ik_0 a}}{\cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \gamma + \frac{1}{\gamma} \right) \sin(ka)}. \quad (17)$$

Щоб обчислити квадрати модулів цих виразів, зручно перш за все розглянути випадок, коли  $E > U_0$ , і, отже, величина  $k$  є дійсною. Тоді

$$R = \frac{(\gamma^2 - 1)^2 \sin^2(ka)}{4\gamma^2 + (\gamma^2 - 1)\sin^2(ka)}, \quad (18)$$

$$D = \frac{4\gamma^2}{4\gamma^2 + (\gamma^2 - 1)\sin^2(ka)}, \quad (19)$$

Легко бачити, що  $R + D = 1$ , що випливає із збереження числа частинок:

$$j_{nad} = j_{відб} + j_{пр}.$$

Оскільки

$$\gamma^2 = \frac{k_0^2}{k^2} = \frac{E}{E - U_0}, \quad (20)$$

а  $\gamma^2 - 1 = \frac{U_0}{E - U_0}$ , то замість (18) і (19) одержимо остаточні вирази для  $R$  і  $D$  при

$E > U_0$ :

$$R = \frac{\sin^2(ka)}{\sin^2(ka) + 4 \frac{E(E - U_0)}{U_0^2}}, \quad (21)$$

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2(ka)}. \quad (22)$$

Відмітимо, що у випадку класичної частинки при  $E > U_0$  має бути  $R = 0$  (а, отже,  $D = 1$ ) – тобто всі частинки “пролітають” над бар’єром. Для квантової частинки, якщо  $k \neq n \frac{\pi}{a}$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), коефіцієнт відбивання  $R \neq 0$ . Це явище має назву надбар’єрного відбивання. Лише при  $k = n \frac{\pi}{a}$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) реалізуються значення  $R = 0$ ,  $D = 1$  (своєрідна “резонансна прозорість” бар’єру, див. рис. 3.5).

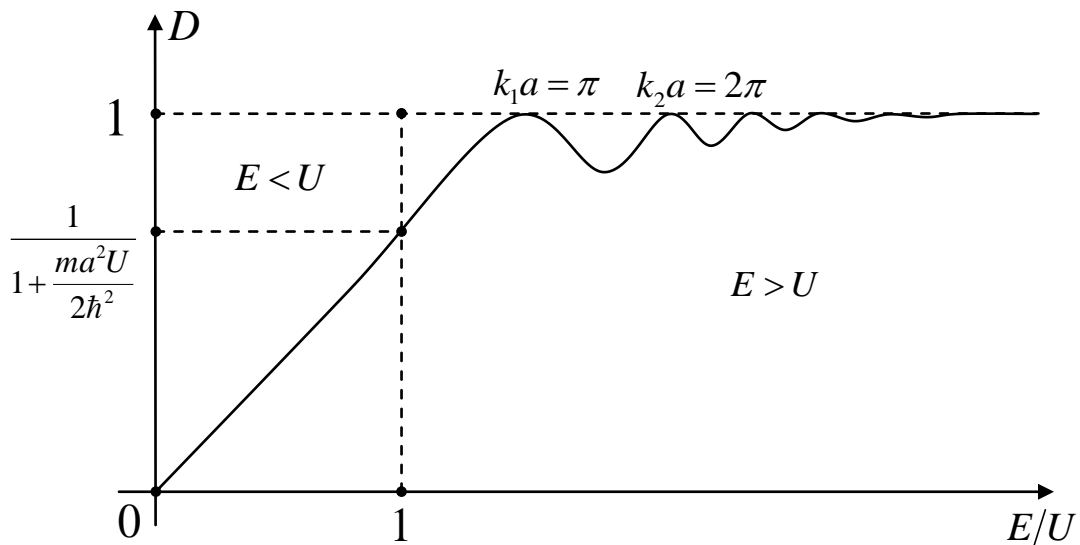


Рис. 3.5. Залежність коефіцієнта прозорості  $D$  від енергії  $E$  для прямокутного бар’єра висотою  $U$  і шириною  $a$

Перейдемо тепер до більш цікавого випадку  $0 < E < U_0$ . У цьому випадку

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = ik', \quad (23)$$

де  $k' = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$  - дійсна величина.

Тоді  $\sin(ka) = i \cdot \operatorname{sh}(k'a)$  і, отже, аналітичне продовження виразів (21) і (22) під бар'єр приводить до виразів

$$R = \frac{\operatorname{sh}^2(k'a)}{\operatorname{sh}^2(k'a) + 4 \frac{E(E - U_0)}{U_0^2}}, \quad (24)$$

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \operatorname{sh}^2(k'a)}. \quad (25)$$

Для класичної частинки при  $E < U$  коефіцієнт прозорості  $D = 0$  (а, відповідно,  $R = 1$ ), оскільки кінетична енергія  $T = E - U$  не може бути від'ємною. Отже, для квантової частинки при  $E < U$  коефіцієнт прозорості  $D \neq 0$ , що принципово відрізняється від класичного випадку – це суттєво квантовий ефект, що отримав назву “тунельного ефекту”.

Розглянемо граничні випадки, що впливають із виразів (24) і (25):

а) при  $E \rightarrow 0$  маємо:  $R \rightarrow 1$ ,  $D \rightarrow 0$ ;

б) при  $E \rightarrow U_0$ , розкривши невизначеність типу  $\frac{0}{0}$ , одержимо

$$R \rightarrow \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2}{ma^2U_0}}, \quad D \rightarrow \frac{1}{1 + \frac{ma^2U_0}{2\hbar^2}};$$

в) при  $E \rightarrow \infty$  маємо:  $R \rightarrow 0$ ,  $D \rightarrow 1$ .

На рисунку 3.5 зображено графік залежності коефіцієнта прозорості  $D$  від енергії  $E$ . Зазначимо, що спектр резонансних значень енергії (при  $E > U_0$ ), коли бар'єр стає повністю прозорим, має таку ж структуру (лише зсунуті на величину  $U_0$ ), як і для енергій стаціонарних станів частинки у безмежно глибокій потенціалній ямі (див. задачу 2):

$$k_n a = n\pi \Rightarrow E_n = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 n^2.$$

У цьому випадку на ширині бар'єру  $a$  відкладається ціле число півхвиль де Бройля:  $a = n \frac{\lambda}{2}$ . У випадку бар'єра значної ширини і висоти, коли  $k'a \gg 1$ ,  $sh(k'a) \approx \frac{e^{k'a}}{2} \gg 1$  і тому вираз для  $D$  можна представити у вигляді:

$$D = D_0 e^{-2k'a} = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot a\right). \quad (26)$$

Вираз (26) може бути узагальнений і на випадок бар'єра довільної форми  $U = U(x)$  (див. рис. 3.6); результат має вигляд:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right), \quad (27)$$

де точки повороту  $x_1$  та  $x_2$  знаходяться із умови  $U(x_1) = E$  і  $U(x_2) = E$ .

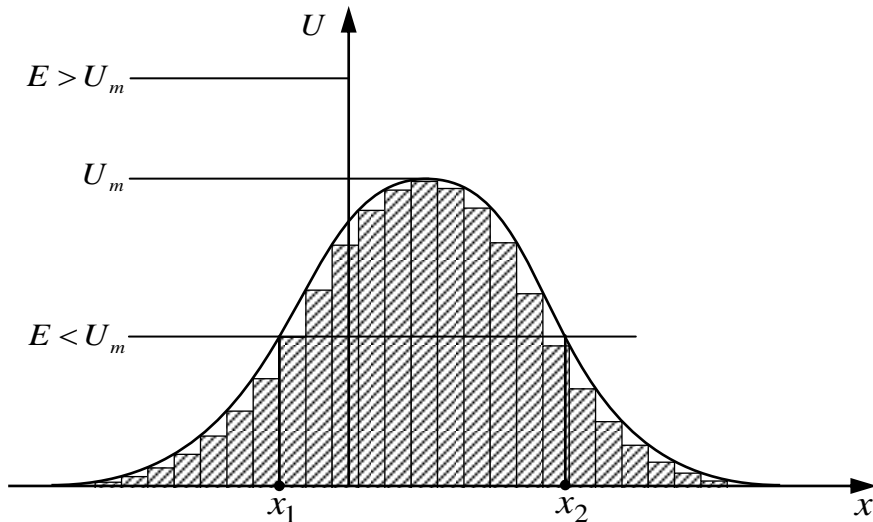


Рис. 3.6. Потенціальний бар'єр  $U = U(x)$

## Задача №5

### Холодна емісія електронів з металу

(інші назви: автоелектронна емісія; тунельна емісія)

Застосуємо формулу (27) задачі №4 для коефіцієнта прозорості  $D$  потенціального бар'єру до розрахунку густини струму електронів, що вилітають з металу під дією зовнішнього електричного поля.

Електрони зони провідності при низьких температурах знаходяться в станах, енергії  $E$  яких лежать в інтервалі  $0 \leq E \leq E_F$ , де  $E_F$  - енергія Фермі. Мінімальна енергія, необхідна для виривання з металу електронів, які мають енергію  $E_F$ , називається роботою виходу  $A$ . Таким чином, для електронів з найменшою енергією потенціальний бар'єр має висоту  $U_0 = E_F + A$  і нескінченну ширину, тобто є непрозорим. Але при включенні електричного поля напруженості  $\vec{E}$  потенціальна енергія електронів в цьому полі лінійно зменшується:  $U_{el}(x) = -eEx$ . Отже, сумарна потенціальна енергія (див. рис. 3.7)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ U_0 - eEx, & x \geq 0. \end{cases} \quad (1)$$

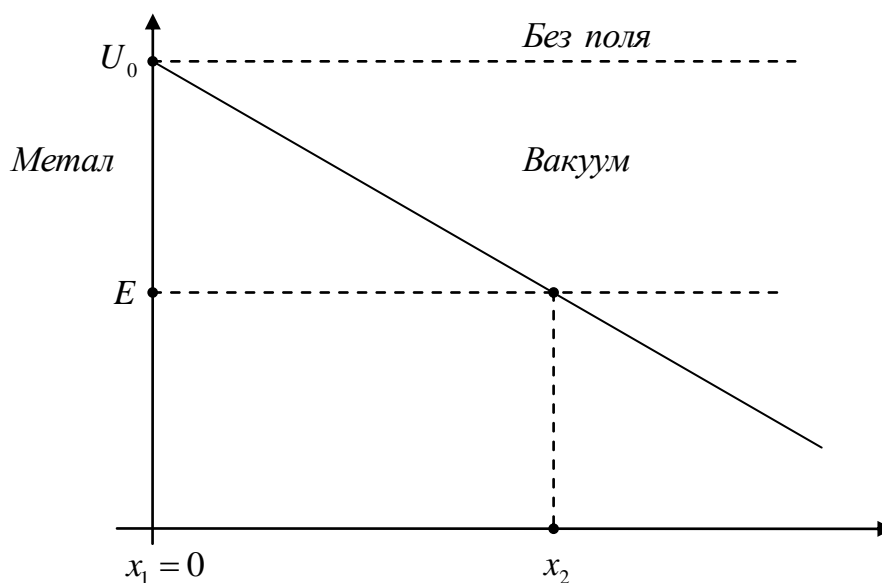


Рис. 3.7.

Використовуючи (27) (задача №4), для коефіцієнта прозорості  $D$  у нашому випадку матимемо:

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

де точки повороту:

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{U_0 - E}{eE}. \quad (3)$$

Враховуємо, що переважна кількість електронів знаходиться на рівні  $E = E_F$ . Тоді  $x_2 = \frac{A}{eE}$ . Оскільки густина струму  $j$  пропорційна коефіцієнту прозорості  $D$ , то залежність  $j$  від величин  $A$  і  $E$  визначається формулою:

$$j(A, E) = j_0 \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{\frac{A}{eE}} \sqrt{A - eEx} dx\right). \quad (4)$$

Інтеграл в (4) легко обчислити; результат має вигляд:

$$\int_0^{\frac{A}{eE}} \sqrt{A - eEx} dx = \frac{2}{3eE} A^{3/2}. \quad (5)$$

Позначивши

$$E_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} A^{3/2} \quad (6)$$

і використовуючи (7), замість (4) одержимо:

$$j(A, E) = j_0 \exp\left(-\frac{E_0}{E}\right). \quad (7)$$

Як видно з рисунка 3.8, величина  $j_0$  має зміст струму насичення (при  $E \gg E_0$ ), а  $E_0$  - характерна величина напруженості електричного поля, при якій струм холо-

дної емісії стає помітним. Те, що характерне значення  $E_0$  пропорціональне  $A^{3/2}$ , одержало в фізиці металів назву “закон 3/2”.

Таблиця 3.1

	Cs	Ag
A (eВ)	1,8	4,3
$E_0$ (В/м)	$16,4 \cdot 10^9$	$60,6 \cdot 10^9$

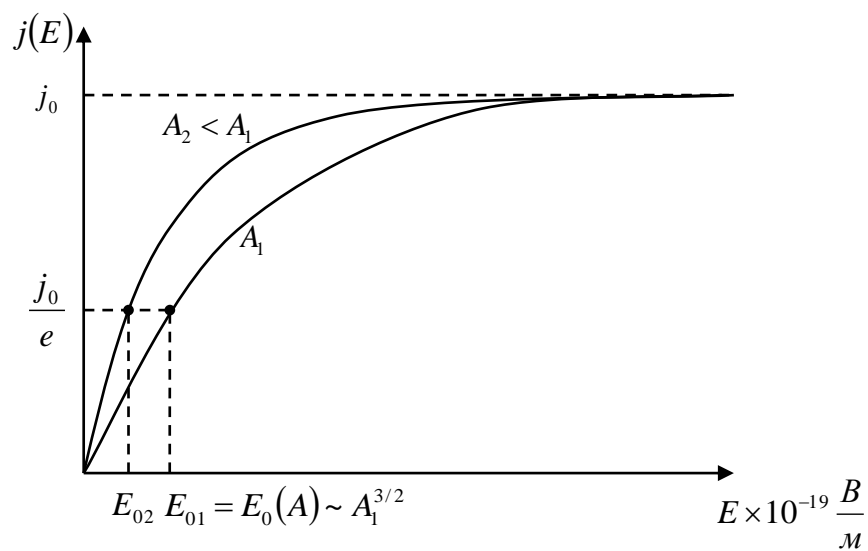


Рис. 3.8.

Таким чином, холодна емісія, на відміну від термоелектричної емісії, є суто квантовим явищем (тунелюванням). Відмітимо, що для одержання помітних значень густини струму потрібні досить великі значення напруженості  $E \sim 10^8 \frac{B}{m}$ .



## Задача №6

### $\alpha$ - розпад важких ядер

Стала розпаду  $\lambda$  визначає відносну кількість ядер, що розпалися за одиницю часу:

$$\lambda = -\frac{1}{N} \frac{dN}{dt} \Rightarrow N = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (1)$$

Тому ця величина пропорційна коефіцієнту прозорості  $D$ :  $\lambda \sim D$ , що дає можливість застосувати формулу (27) задачі №4 і одержати наступне співвідношення:

$$\lambda = \lambda_0 \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{U(r) - E} dr\right), \quad (2)$$

де  $\lambda_0$  - деяка стала, що має розмірність таку ж, як і  $\lambda$ , тобто  $c^{-1}$ ;  $m$  - маса  $\alpha$ -частинки.

Ще в 1911 році Г. Гайтлер і Дж. Нетол встановили таку емпіричну залежність (див. (1))

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = A - \frac{B}{v}, \quad (3)$$

де  $A$  і  $B$  - константи, що залежать від характеристик ядра, а  $v$  - швидкість  $\alpha$ -частинки. Як видно з рис. 3.9, із приведеного графіка легко визначити параметри  $A$  і  $B$ .

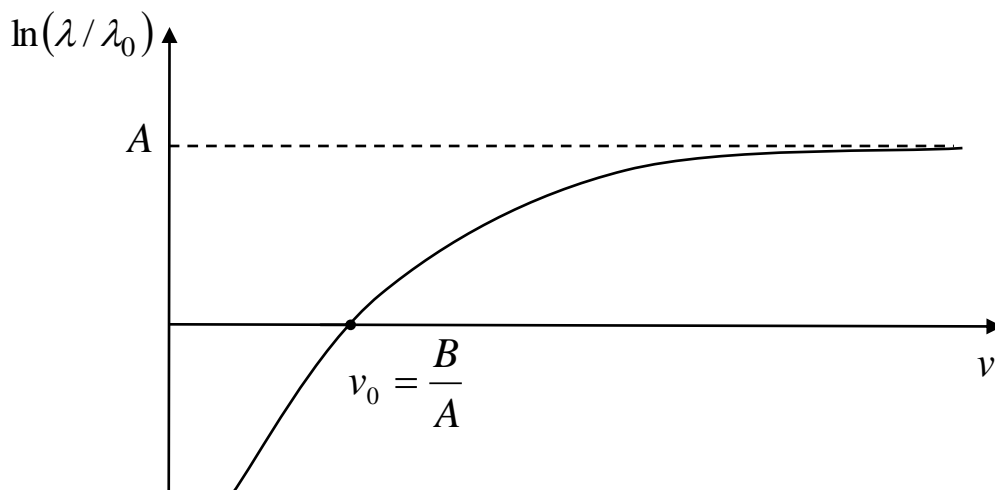


Рис. 3.9.

**Завдання.** Одержати формулу (3), розглядаючи  $\alpha$ -розпад, як тунелювання  $\alpha$ -частинок через бар'єр, утворений ядерним та кулонівським потенціалами; визначити залежність параметрів  $A$  і  $B$  від характеристик ядра.

Потенціальну енергію  $U(r)$   $\alpha$ -частинок представимо як суму двох потенціалів – ядерного  $U_{яд}$  та кулонівського  $U_{кул}$ :

$$U = U_{яд} + U_{кул},$$

де

$$U_{яд} = -\frac{g^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right), \quad (4)$$

$$U_{кул} = k \frac{2e^2 \tilde{Z}}{r}, \quad \tilde{Z} = Z - 2, \quad k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{н} \cdot \text{м}^2}{\text{к}^2}. \quad (5)$$

Оскільки вид потенціальної енергії  $\alpha$ -частинки всередині ядра, тобто при  $r < r_0$  ( $r_0$  - “радіус” ядра), є несуттєвим, то для обчислень можемо використати такий спрощений вид потенціалу  $U(r)$  (рис.3.10):

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq r_0, \\ k \frac{2e^2 \tilde{Z}}{r}, & r > r_0. \end{cases} \quad (6)$$

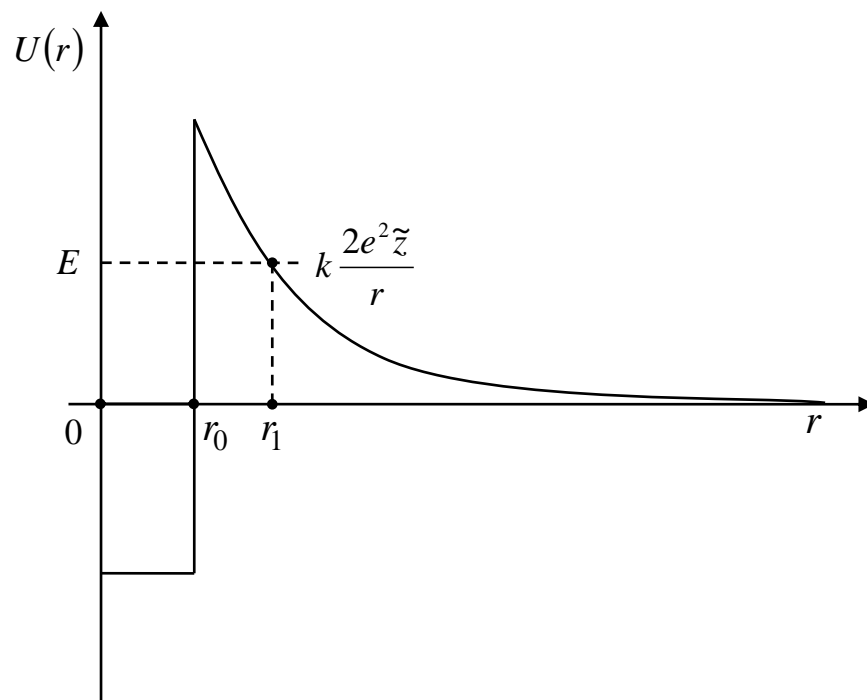


Рис. 3.10.

Використовуючи (6), із (2) одержимо<sup>1</sup>:

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{k \frac{2e^2 \tilde{Z}}{r} - E} dr, \quad (7)$$

де точка повороту  $r_1$  визначається умовою:

$$U(r_1) = E \Rightarrow r_1 = k \frac{2e^2 \tilde{Z}}{E}. \quad (8)$$

Для обчислення інтегралу в (7) перейдемо до нової змінної:

$$x = \sqrt{\frac{r}{r_1}}, \quad r = r_1 x^2. \quad (9)$$

Підставивши (9) у (7), з урахуванням (8) одержимо:

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = -\frac{4r_1 \sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{\sqrt{\frac{r_0}{r_1}}}^1 \sqrt{1-x^2} dx. \quad (10)$$

Використовуючи вираз для первісної

$$\int \sqrt{1-x^2} dx = \frac{x}{2} \sqrt{1-x^2} + \frac{\arcsin x}{2} + const, \quad (11)$$

і підставляючи (11) у вираз (10), одержимо:

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = -\frac{2r_1 \sqrt{2mE}}{\hbar} \left( \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \left( 1 - \frac{r_0}{r_1} \right) - \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right). \quad (12)$$

Природно припустити, що  $r_1 \gg r_0$ ;  $r_1 \gg r_0$  зберігаючи при цьому у степеневому розкладі лише члени першого порядку за  $r_0/r_1$ , матимемо

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = -\frac{2r_1 \sqrt{2mE}}{\hbar} \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right). \quad (13)$$

Оскільки поза ядром для нерелятивістської  $\alpha$ -частинки  $E = \frac{mv^2}{2}$ , то одержимо таку кінцеву формулу

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_0} = 8\sqrt{\tilde{Z} \frac{r_0}{a}} - 4\pi\tilde{Z}k \frac{e^2}{\hbar v}, \quad a = \frac{\hbar^2}{kme^2}. \quad (14)$$

<sup>1</sup> Застосування одновимірної формули тунелювання для фактично тривимірної задачі можливо, якщо вважати орбітальний момент  $\alpha$ -частинки рівний нулю, що дозволяє розглядати лише радіальний рух.

Порівнявши (14) з (3), визначимо параметри  $A$  і  $B$ :

$$A = 8\sqrt{\tilde{Z} \frac{r_0}{a}}, \quad B = -4\pi\tilde{Z}k \frac{e^2}{\hbar}. \quad (15)$$

### Задача №7

#### Сферично симетрична прямокутна потенціальна яма

Розглянемо взаємодію між частинками, яка описується потенціалом, абсолютна величина якого достатньо швидко (швидше, ніж  $1/r$ ) спадає при  $r \rightarrow \infty$ . У багатьох випадках можна вважати, що на деякій відстані  $a$  взаємодією можна взагалі знехтувати, поклавши  $U(r) = 0$  при  $r > a$ . Такі потенціали називають короткодійними, а параметр  $a$  - радіусом їх дії.

Прикладом швидко затухаючого потенціалу притягання є потенціал Вудса-Саксона

$$U(r) = -\frac{U_0(r)}{1 + \exp\left(\frac{r-a}{b}\right)}, \quad (1)$$

де  $U_0$ ,  $a$  і  $b$  - деякі додатні параметри (рис.3.11). Такий потенціал широко використовується у ядерній фізиці для описання взаємодії нейтронів з атомними ядрами. Параметр  $a$  визначає розміри області локалізації взаємодії, а параметр  $b$  - розміри тої області, де відбувається найбільш швидка зміна потенціалу. При  $b \rightarrow 0$  потенціал (1) переходить у потенціал сферично симетричної прямокутної потенціальної ями радіуса  $a$  (див. рис.3.11).

Знайдемо енергії і хвильові функції стаціонарних станів для руху частинки у полі сферично симетричної прямокутної потенціальної ями з потенціальною енергією:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 < 0 & \text{при } 0 \leq r \leq a, & (I) \\ 0 & \text{при } r > a. & (II) \end{cases} \quad (2)$$

Нехай орбітальний момент частинки  $\ell = 0$ . Оскільки потенціал (2) сферично симетричний, хвильову функцію  $\psi_{n00}(\vec{r})$  можна представити у вигляді

$$\psi_{n00}(\vec{r}) = \frac{u_{n0}(r)}{r} Y_{00}(\theta, \varphi), \quad (3)$$

де “радіальна” функція  $u_{n0}(r) \equiv u(r)$  задовольняє рівняння Шредінгера

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(r)) u(r) = 0. \quad (4)$$

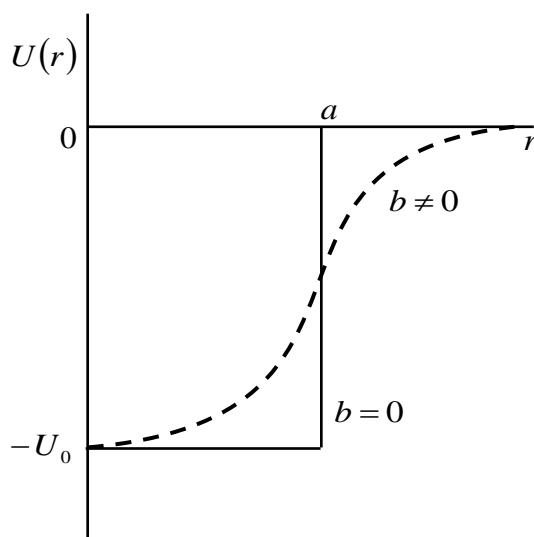


Рис. 3.11. Потенціали Вудса-Саксона ( $b \neq 0$ ) та сферично симетричної прямокутної потенціальної ями ( $b = 0$ )

Розв’язки рівняння (4) повинні задовольняти початковій умові

$$u(0) = 0. \quad (5)$$

Шукаємо енергію в інтервалі  $-U_0 < E \leq 0$ . У просторовій області (I) маємо

$$\frac{d^2 u_I(r)}{dr^2} + k^2 u_I(r) = 0, \quad (6)$$

де  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(U_0 - |E|)}$ .

Розв’язок рівняння (6) має вигляд

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

Із граничної умови (5) одержимо  $B = 0$ , тому

$$u_I(r) = A \sin(kr). \quad (7)$$

У просторовій області (II) маємо

$$\frac{d^2 u_{II}(r)}{dr^2} - k'^2 u_{II}(r) = 0, \quad (8)$$

де  $k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu|E|}$ .

Розв'язок рівняння (8) має вигляд

$$u_{II}(r) = Ce^{k'r} + De^{-k'r}.$$

Із умови квадратичної інтегрованості функції  $u(r)$  одержимо  $C = 0$ , тому

$$u_{II}(r) = De^{-k'r}. \quad (9)$$

Використаємо тепер умови неперервності функції  $u(r)$  та її похідної  $u'(r)$  в точці  $r = a$ :

$$\begin{aligned} u_I(a) = u_{II}(a) &\Rightarrow A \sin(ka) = De^{-k'a}, \\ u'_I(a) = u'_{II}(a) &\Rightarrow Ak \cos(ka) = -Dk'e^{-k'a}, \end{aligned}$$

звідки одержимо трансцендентне рівняння

$$-k \cdot \text{ctg}(ka) = k'. \quad (10)$$

Рівнянню (10) відповідає графік на рис. 3.12.

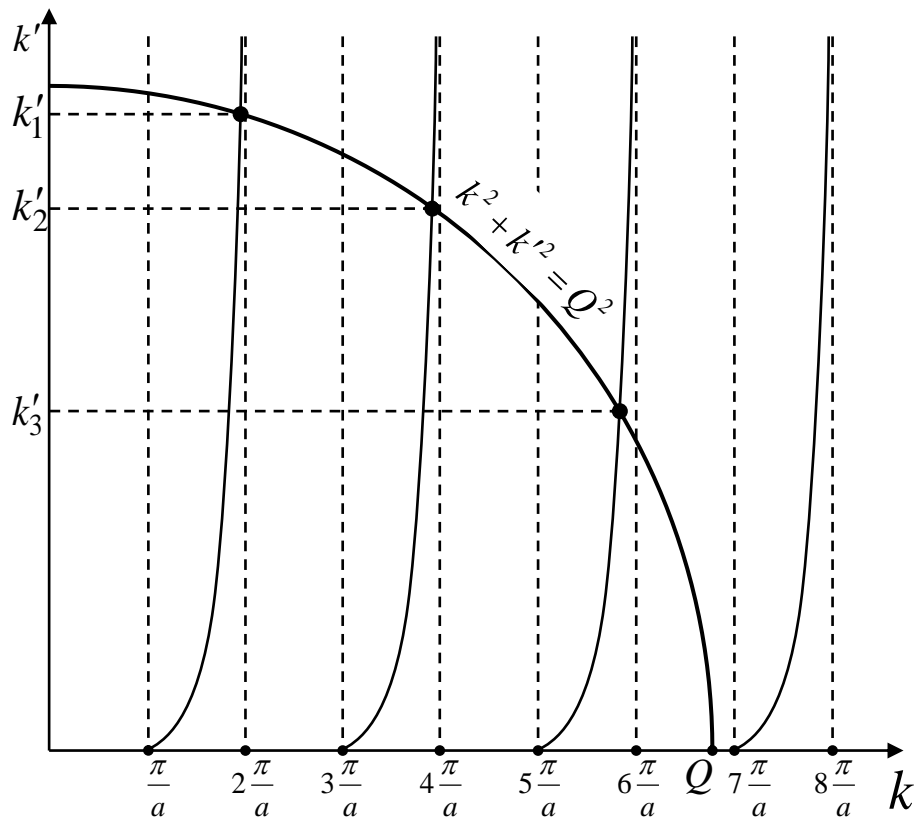


Рис. 3.12

### 3.4. Наближені методи розв'язання квантово-механічних задач

#### Задача №8

#### Ангармонічний осцилятор

Застосовуючи стаціонарну теорію збурень, знайти у першому та другому наближеннях рівні енергії та хвильові функції частинки в полі

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + W, \quad (1)$$

$$W = \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x$$

(ангармонічний осцилятор).

Відомо, що розв'язання незбуреної задачі при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  (гармонічний осцилятор) дає невироджені власні значення оператора  $\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$ , які дорівнюють:

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

Тому для знаходження власних значень і власних функцій оператора  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$  застосуємо теорію збурень при відсутності виродження. У другому порядку теорії збурень маємо:

$$E_n = E_n^0 + \langle n | W | k \rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n | W | k \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0} \quad (3)$$

і

$$\psi_n = \psi_n^0 + \sum_{k \neq n} \frac{\langle k | W | n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \psi_k^0, \quad (4)$$

де  $\psi_n^0 = C_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$ ,  $H_n$  - поліном Ерміта,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ .

Задача зводиться до обчислення матричних елементів

$$\langle k | W | n \rangle = \langle k | W_1 | n \rangle + \langle k | W_2 | n \rangle,$$

де  $W_1 = \varepsilon_1 x^3$  і  $W_2 = \varepsilon_2 x$ . Використовуючи властивості ортогональності поліномів Ерміта, можна обчислити наступні матричні елементи координати  $x$ :

$$\begin{aligned}\langle n|x|n+1\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}, \\ \langle n|x|n-1\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}, \\ \langle n|x|k\rangle &= 0, \quad k \neq n \pm 1.\end{aligned}\tag{5}$$

Результати (5) можна переписати у компактнішому вигляді:

$$\langle n|x|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \cdot \delta_{n,k+1} + \sqrt{n+1} \cdot \delta_{k,n+1}).\tag{6}$$

Обчислимо матричні елементи  $\langle n|W_i|k\rangle$ , використовуючи (6) та правило множення матриць:

$$\langle n|W_i|k\rangle = \varepsilon_1 \langle n|x^3|k\rangle = \varepsilon_1 \sum_{\ell} \langle n|x^2|\ell\rangle \langle \ell|x|k\rangle.$$

У свою чергу

$$\begin{aligned}\langle n|x^2|\ell\rangle &= \sum_p \langle n|x|p\rangle \langle p|x|\ell\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_p (\sqrt{n} \cdot \delta_{n,p+1} + \sqrt{n+1} \cdot \delta_{n+1,p}) (\sqrt{p} \cdot \delta_{p,\ell+1} + \sqrt{p+1} \cdot \delta_{\ell,p+1}).\end{aligned}$$

Очевидно, що у добутках виду  $\sqrt{p} \cdot \delta_{p,\ell+1}$  можна  $\sqrt{p}$  замінити на  $\sqrt{\ell+1}$  і  $\delta_{n,p+1}$  на  $\delta_{p,n-1}$ . В силу цього

$$\begin{aligned}\langle n|x^2|\ell\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ \sqrt{n(\ell+1)} \sum_p \delta_{n-1,p} \cdot \delta_{p,\ell+1} + \right. \\ &+ \sqrt{(n+1)(\ell+1)} \sum_p \delta_{n+1,p} \cdot \delta_{p,\ell+1} + \sqrt{n\ell} \sum_p \delta_{n-1,p} \cdot \delta_{p,\ell-1} + \\ &\left. + \sqrt{(n+1)\ell} \sum_p \delta_{n+1,p} \cdot \delta_{p,\ell-1} \right]\end{aligned}$$

і, наприклад, перший доданок буде рівний



$$\sqrt{n(\ell+1)} \sum_p \delta_{n-1,p} \cdot \delta_{p,\ell+1} = \sqrt{n(\ell+1)} (\delta \cdot \delta)_{n-1,\ell+1} = \delta_{n,\ell+2} \sqrt{n(\ell+1)} = \delta_{n,\ell+2} \sqrt{n(n-1)};$$

позаяк  $\delta_{ik}$  є одиничною матрицею, то  $\delta^2 = \delta$ .

Виконавши подібну операцію з усіма членами, одержимо:

$$\langle n|x^2|\ell\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ \sqrt{n(n-1)} \delta_{n,\ell+2} + (2n+1) \delta_{n\ell} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n,\ell-2} \right]. \quad (7)$$

Підставивши цей вираз у  $\langle n|x^3|\ell\rangle$  і виконавши аналогічні обчислення, можемо написати

$$\begin{aligned} \langle n|x^3|\ell\rangle &= \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \sum_{\ell} \left[ \sqrt{n(n-1)} \delta_{n,\ell+2} + (2n+1) \delta_{n\ell} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n,\ell-2} \right] \cdot \left[ \sqrt{\ell} \cdot \delta_{\ell,k+1} + \sqrt{k} \cdot \delta_{\ell,k-1} \right] = \\ &= \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \left[ \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{n,k+3} + 3n^{3/2} \delta_{n,k+1} + \right. \\ &\quad \left. + 3(n+1)^{3/2} \delta_{n,k-1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \cdot \delta_{n,k-3} \right]. \end{aligned}$$

Таким чином,  $\langle n|W_1|n\rangle = 0$  і  $\langle n|W_1|k\rangle$  для заданого  $n$  відмінний від нуля лише у чотирьох випадках: при  $k = n \pm 1$  і  $k = n \pm 3$ . Значить, цей член дає поправку у формулі (3) лише у другому порядку, а у формулі (4) – у першому, і ми можемо обмежитися лише ними. Враховуючи, що знаменники формул (3) і (4) при  $k = n \pm 1$  дорівнюють  $E_n^0 - E_{n\pm 1}^0 = \mp \hbar\omega$ , а при  $k = n \pm 3$  -  $E_n^0 - E_{n\pm 3}^0 = \mp 3\hbar\omega$ , можна записати

$$\begin{aligned} \psi_n &= \psi_n^0 + \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \left[ \frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)}}{3\hbar\omega} \psi_{n-3}^0 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}}{-3\hbar\omega} \psi_{n+3}^0 + \frac{3(n+1)^{3/2}}{-\hbar\omega} \psi_{n+1}^0 + \frac{3n^{3/2}}{\hbar\omega} \psi_{n-1}^0 \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

При обчисленні енергії необхідно врахувати поряд із поправкою другого порядку від  $\hat{W}_1$  також і поправку першого порядку від  $\hat{W}_2$ , тобто обчислити  $\langle n|W_2|n\rangle = \varepsilon_2 \langle n|x^4|n\rangle$ . Аналогічно одержимо

$$\begin{aligned}
\langle n|x^4|n\rangle &= \sum_k \langle n|x^3|k\rangle \langle k|x|n\rangle = \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \sum_k \left[ \sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{n,k+2} + 3n^{3/2}\delta_{n,k+1} + \right. \\
&\quad \left. + 3(n+1)^{3/2}\delta_{n,k-1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{n,k-3} \right] \times \\
&\quad \times \left[ \sqrt{n}\cdot\delta_{n,k+1} + \sqrt{n+1}\cdot\delta_{n,k-1} \right] = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left[ 3n^2 + 3(n+1)^2 \right].
\end{aligned} \tag{9}$$

Зазначимо, що відмінні від нуля результати одержимо лише при множенні  $\delta_{n,k+1} \cdot \delta_{n,k+1}$  і  $\delta_{n,k-1} \cdot \delta_{n,k-1}$ . Інші члени дорівнюють нулю, наприклад,  $\sum_k \delta_{n,k+3} \cdot \delta_{n,k+1} = \delta_{n-3,n-1} = 0$ .

Таким чином, маємо:

$$\begin{aligned}
E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \varepsilon_2 \langle n|x^4|n\rangle + \varepsilon_1^2 \left[ \frac{\langle n|x^3|n-3\rangle^2}{3\hbar\omega} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\langle n|x^3|n+3\rangle^2}{-3\hbar\omega} + \frac{\langle n|x^3|n-1\rangle^2}{\hbar\omega} + \frac{\langle n|x^3|n+1\rangle^2}{-\hbar\omega} \right].
\end{aligned}$$

У результаті одержимо остаточний результат:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + 3\varepsilon_2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1) - \frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 (30n^2 + 30n + 11). \tag{10}$$

## Література

1. І.О. Вакарчук. Квантова механіка – Львів: ЛНУ імені Івана Франка. – 2012. – 872 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория — М.: Наука. — 1974. — 760 с.
3. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики — М.: Наука. — 1970. — 664 с.
4. Л. Шифф. Квантовая механика — М.: Иностранная литература. — 1959. — 473 с.
5. В.В. Балашов, В.К. Долинов. Курс квантовой механіки — М.: МГУ. — 1982. — 280 с.
6. Г. Бете. Квантовая механика — М.: Мир. — 1965. — 334 с.
7. Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томасевич, А.М. Федорченко. Сборник задач по теоретической физике – М.: Высш. Школа. – 1975. – 336 с.
8. В.И. Коган, В.М. Галицкий. Сборник задач по квантовой механике – М.: Тех-нико-теоретическая література. – 1956. – 415 с.

Карбованець М.І., Лазур В.Ю., Нодь Є.А. Практикум з квантової механіки. – Ужгород: Видавництво УжНУ “Говерла”, 2022. – 52 с.

**Рецензент:**

доктор фізико-математичних наук, професор, старший науковий співробітник відділу електронних процесів і елементарних взаємодій ІЕФ НАН України

Гайсак М.І.

**Відповідальний за випуск:**

доктор фізико-математичних наук, професор,

декан фізичного факультету

Лазур В.Ю.

Практикум створено на базі частини лекційних курсів “Основи квантової фізики” та “Квантова механіка”, що читаються студентам фізичного факультету УжНУ спеціальностей “Телекомунікації та радіотехніка”, “Прикладна фізика і наноматеріали”, “Мікро- та наносистемна техніка”, “Фізика та астрономія” та “Середня освіта. Фізика”. Він містить ряд основних ідей і методів квантової механіки в обсязі, достатньому для їх подальшого застосування в курсах теоретичної фізики та спецкурсах. Практикум містить завдання різного рівня складності, приведено детальні розв’язки запропонованих задач.

Практикум розраховано на студентів фізико-математичних та інженерно-технічних спеціальностей університетів.

*Рекомендовано до друку методичною комісією фізичного факультету  
(протокол № 4 від 14.12.2021 року).*

Формат 60×84/16. Умовн. друк. арк. 3,02.  
Видавництво УжНУ "Говерла". м. Ужгород, вул. Капітульна, 18.