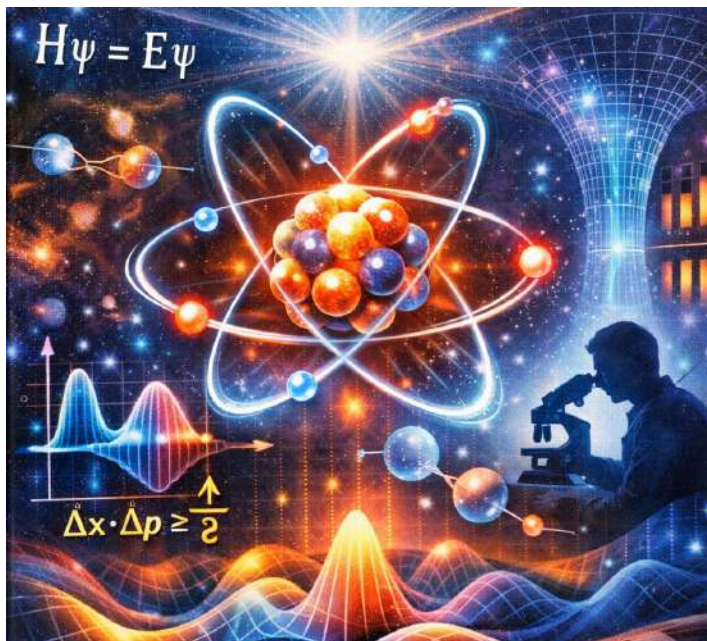




Збірник практичних завдань з курсу

«Квантова Механіка»

для спеціальності

**«А4 Середня освіта (Фізика та
астрономія)»**

Грищук А.М. Бендес Ю.П.

Міністерство освіти і науки України
Житомирський державний університет
імені Івана Франка

А.М. Грищук, Ю.П. Бендес

**Навчально-методичний посібник
для здобувачів першого (бакалаврського) рівня
вищої освіти
спеціальності
«А4 Середня освіта (Фізика та астрономія)»**

Житомир
ЖДУ
2026

УДК 530.145

ББК 22.3

Г-82

*Рекомендовано до друку Вченою радою Житомирського державного
університету імені Івана Франка
(протокол №12 від 26 червня 2026 р.).*

Рецензенти:

О.М. Маханець, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання, Чернівецького національного університету імені Ю.Федьковича

Ю.В. Доготар методист лабораторії упровадження освітніх інновацій (методика навчання фізики та астрономії), КЗ «Житомирський ОІППО» ЖОР.

В.Л. Рудніцький, директор Наукового ліцею Житомирського державного університету імені Івана Франка.

г-82 Гришук А.М., Збірник практичних завдань з курсу «Квантова Механіка» для спеціальності «А4 Середня освіта (Фізика та астрономія)»/ Гришук А.М., Бендес Ю.П. – Житомир: ЖДУ, 2026. – 82с.

Навчально-методичний посібник для студентів спеціальності "А4 Середня освіта (Фізика та астрономія)", присвячений курсу "Квантова Механіка", розглядає два головні змістові модулі (що охоплюють дванадцять практичних тем), додатки та містить відповіді до практичних завдань.

Перший змістовий модуль, "Основні поняття квантової механіки", охоплює завдання, пов'язані з описом стану мікрочастинок за допомогою хвильової функції та її статистичного змісту, математичним апаратом лінійних самоспряжених операторів, їхніх комутаторів та середніх значень, розв'язанням рівнянь на власні функції та спектри фізичних величин, практичним застосуванням співвідношення невизначеностей Гейзенберга для оцінки параметрів мікросистем, а також вивченням часового рівняння Шредингера

Другий змістовий модуль, "Найпростіші задачі з квантової механіки", включає в себе завдання, які охоплюють поведінку мікрочастинок в одновимірних потенціальних ямах нескінченної та скінченної глибини, проходження крізь потенціальні бар'єри та розрахунок коефіцієнтів тунелювання, квантово-механічний опис лінійного гармонійного осцилятора, дослідження руху в центральносиметричному полі на прикладі атома водню з аналізом його енергетичного спектра, а також вивчення наближених методів розрахунку за стаціонарною теорією збурень.

ББК 22.3

УДК 530.145

© Гришук А.М.

© ЖДУ

ВСТУП

Сучасний етап розвитку природничих наук характеризується глибоким проникненням ідей та методів квантової фізики в суміжні галузі — від хімії та біології до матеріалознавства, нанотехнологій та космології. Курс «Квантова механіка» є фундаментальним складником теоретичної підготовки бакалаврів спеціальності 014.08 Середня освіта (Фізика та астрономія). Він покликаний закласти підґрунтя для розуміння мікросвіту, сформувати сучасну наукову картину світу та підготувати майбутнього вчителя до викладання складних тем квантової та атомної фізики в закладах загальної середньої освіти (ліцеях, профільних класах).

Головна особливість вивчення квантової механіки студентами педагогічних спеціальностей полягає у необхідності поєднання глибокого математичного апарату теорії з розробленням наочних, методично доцільних інтерпретацій для учнів. Цей методичний посібник «Збірник практичних завдань» розроблений як дієвий інструмент для аудиторної та самостійної роботи студентів, що забезпечує не лише засвоєння теоретичних положень, а й набуття практичних навичок розв'язання фізичних задач.

Метою видання є надання методичної допомоги студентам у процесі опанування математичного апарату та фізичних принципів квантової механіки, розвиток логічного та абстрактного мислення, а також формування готовності застосовувати отримані знання у майбутній професійній (педагогічній) діяльності.

Основні завдання посібника: систематизувати теоретичний матеріал з кожного розділу курсу через лаконічний виклад ключових формул та понять; продемонструвати детальні алгоритми розв'язання типових фізичних задач мікросвіту; забезпечити дидактичним матеріалом аудиторні заняття та організувати ефективну самостійну роботу студентів; навчити трансформувати абстрактні квантово-

механічні поняття у наочні дидактичні моделі, адаптовані для шкільної аудиторії.

Навчальний посібник орієнтований на розвиток ключових фахових компетентностей, визначених навчальною програмою дисципліни:

ПК2. Предметна компетентність у сфері фізики та астрономії: Збірник містить систему задач, спрямованих на глибоке розуміння фізичних законів мікросвіту (від поведінки вільної частинки до структури атома водню). Розв'язуючи задачі на знаходження середніх значень, власних функцій та спектрів енергії, студент опановує фундаментальний математичний апарат теоретичної фізики й усвідомлює фізичний зміст квантових явищ.

ПК3. Методична компетентність:

Завдання побудовані таким чином, щоб майбутній учитель не просто проводив формальні математичні викладки, а аналізував отримані результати в граничних випадках (наприклад, перехід до класичної фізики при $\hbar \rightarrow 0$, принцип відповідності Бора). Це формує вміння пояснювати учням складні концепції (співвідношення невизначеностей Гейзенберга, тунельний ефект) без викривлення їхньої фізичної суті.

ПК5. Інформаційно-комунікаційна (цифрова) компетентність: Методичний апарат посібника передбачає інтеграцію з комп'ютерним моделюванням. Студентам пропонується порівнювати отримані аналітичні розв'язки (наприклад, для потенційних бар'єрів або гармонійного осцилятора) з результатами комп'ютерних інтерактивних симуляцій (зокрема PhET Interactive Simulations). Це навчає майбутніх педагогів використовувати сучасні цифрові інструменти у навчальному процесі.

У результаті роботи із цим посібником студент має досягти таких програмних результатів навчання:

ПРН2. Знати й розуміти фундаментальні концепції, принципи, теорії та закони фізики й астрономії, на яких базується сучасна квантова теорія; розуміти межі застосовності класичних та квантових уявлень про рух мікрочастинок.

ПРН4. Уміти самостійно формулювати та розв'язувати теоретичні й прикладні задачі з квантової механіки, застосовуючи відповідний математичний апарат (диференціальні рівняння в частинних похідних, теорію операторів, матричне числення, наближені методи теорії збурень).

ПРН6. Уміти ефективно використовувати комп'ютерне моделювання, інтерактивні візуалізації та інформаційні ресурси мережі Інтернет для дослідження мікросистем, унаочнення результатів розрахунків та підготовки навчальних матеріалів для майбутніх уроків фізики.

Весь матеріал посібника структуровано відповідно до двох змістових модулів робочої програми.

Модуль 1 «Основні поняття квантової механіки» (Практичні заняття №1–6): концентрується на хвильовій функції, апараті лінійних самоспряжених операторів, співвідношенні невизначеностей та динаміці квантових станів (рівняння Шредінгера).

Модуль 2 «Найпростіші задачі з квантової механіки» (Практичні заняття №7–12): присвячений застосуванню теорії до конкретних модельних та реальних систем (потенціальні ями та бар'єри, одновимірний осцилятор, тривимірні центральносиметричні системи, теорія збурень).

Для успішного засвоєння курсу рекомендується не обмежуватися механічним відтворенням формул, а детально аналізувати фізичний зміст кожного одержаного результату. Слід пам'ятати, що квантова механіка вимагає відмови від звичних наочних образів макросвіту і формування нової фізичної інтуїції, яка базується на ймовірнісному трактуванні явищ мікросвіту.

МОДУЛЬ 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

**Практичне заняття №1. Опис стану в квантовій
механіці. Хвильова функція вільної частинки та її
статистичний зміст. Умова нормування.**

Мета: Сформувати розуміння ймовірнісного опису стану мікрочастинок; навчити студентів працювати з хвильовою функцією (Ψ -функцією), розраховувати густину ймовірності, знаходити коефіцієнт нормування та аналізувати фізичний зміст квантових станів.

1. Теоретичний мінімум та базові формули

У квантовій механіці стан системи повністю описується комплексним скалярним полем — **хвильовою функцією** $\Psi(\vec{r}, t)$, яка залежить від координат $\vec{r}(x, y, z)$ та часу t .

Статистична інтерпретація Борна

Сама хвильова функція не є безпосередньо вимірюваною фізичною величиною. Фізичний зміст має квадрат її модуля. Величина

$$w(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$$

визначає **густину ймовірності** знаходження частинки в момент часу t в околі точки з радіус-вектором $\vec{r}$. Тут Ψ^* — функція, комплексно-спряжена до Ψ .

Ймовірність dP знайти частинку в елементарному об'ємі $dV = dx dy dz$ становить:

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

Умова нормування

Оскільки ймовірність знайти частинку бодай де-небудь у просторі дорівнює одиниці (достовірна подія), виконується **умова нормування**:

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

Для одновимірного руху по осі Ox інтеграл набуває вигляду:

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

Стандартні (природні) умови

Фізичний зміст мають лише ті хвильові функції, які задовольняють вимоги регулярності. Хвильова функція має бути:

1. **Скінченною** (в усіх точках простору).
2. **Однозначною** (кожному стану відповідає єдине значення ймовірності).
3. **Неперервною** (разом зі своїми першими похідними по координатах).
4. **Квадратично інтегрованою** (інтеграл від квадрата модуля має збігатися).

Вільна частинка

Частинка, на яку не діють зовнішні сили (потенціальна енергія $U = 0$). Стан вільної частинки з чітко визначеним імпульсом $\vec{p}$ та енергією E описується плоских хвилею де Бройля:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

де A — амплітуда хвилі, $\vec{k} = \vec{p} / \hbar$ — хвильовий вектор, $\omega = E / \hbar$ — циклічна частота, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ — зведена стала Планка.

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Знаходження нормувального множника та аналіз стану.

Частинка здійснює одновимірний рух уздовж осі Ox . Її стан описується хвильовою функцією:

$$\psi(x) = A e^{-\alpha|x|}, \quad \alpha > 0$$

де α — відома дійсна стала.

1. Знайдіть нормувальний множник A (приймавши його за дійсне число).

2. Визначте ймовірність перебування частинки в інтервалі $-\frac{1}{2\alpha} \leq x \leq \frac{1}{2\alpha}$.

Розв'язання:

1. Знаходження нормувального множника A . Запишемо умову нормування для одновимірного випадку:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\alpha|x|} dx = 1$$

Оскільки підінтегральна функція є парною, ми можемо змінити межі інтегрування від 0 до $+\infty$, подвоївши значення інтеграла (при $x \geq 0$, $|x| = x$):

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

Обчислимо інтеграл:

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

Підставимо значення інтеграла у нормувальне співвідношення:

$$2A^2 \cdot \frac{1}{2\alpha} = 1 \Rightarrow \frac{A^2}{\alpha} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\alpha}$$

Таким чином, нормована хвильова функція має вигляд:

$$\psi(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$$

2. Обчислення ймовірності перебування частинки в заданому інтервалі. Шукана ймовірність P дорівнює:

$$P = \int_{-x_0}^{x_0} |\psi(x)|^2 dx, \quad \text{якщо } x_0 = \frac{1}{2\alpha}$$

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

$$P = 2\alpha \left[-\frac{1}{2\alpha} e^{-2\alpha x} \right]_0^{1/(2\alpha)} = - \left(e^{-2\alpha \cdot \frac{1}{2\alpha}} - e^0 \right) = -(e^{-1} - 1) = 1 - e^{-1} \approx 0,632 \quad (63,2\%)$$

Відповідь: $A = \sqrt{\alpha}$; ймовірність знаходження частинки в заданому інтервалі становить $1 - e^{-1} \approx 63,2\%$.

Методична порада для вчителя: Ця задача демонструє так званий локалізований стан (хвильовий пакет). Покажіть студентам графік цієї функції. Зверніть увагу, що чим більшим є параметр α , тим сильніше стискається графік до осі ординат (частинка сильніше локалізована поблизу нуля), що є гарною ілюстрацією поняття просторової локалізації.

Задача 2. Особливість нормування станів неперервного спектра (вільна частинка).

Дослідити можливість нормування хвильової функції вільної частинки (плоскої хвилі де Бройля) $\psi(x) = Ae^{ikx}$ на інтервалі $-\infty < x < \infty$.

Розв'язання: Спробуємо застосувати стандартну умову нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-ikx} \cdot Ae^{ikx} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot dx = A^2 [x]_{-\infty}^{\infty} = \infty$$

Цей інтеграл розбігається. Це означає, що плоску хвилю де Бройля неможливо нормувати «на одиницю» на нескінченному інтервалі.

Фізичний зміст: Фізично ідеалізований стан із точно визначеним імпульсом $\vec{p}$ повністю делокалізований у просторі (ймовірність виявити частинку однакова в будь-якій точці Всесвіту). Для таких функцій використовують два інші типи нормування:

1. **Нормування на δ -функцію Дірака** (за

імпульсом): $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$, тоді $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

2. **Нормування на один потік частинок** (або у

великому "скриньковому" об'ємі періодичності L).

3. Задачі для аудиторної роботи

1.1. Частинка перебуває в одновимірній потенціальній ямі шириною L ($0 \leq x \leq L$). Хвильова функція частинки в основному стані має вигляд:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x < 0 \text{ або } x > L \end{cases}$$

Визначте нормувальний коефіцієнт A .

Знайдіть ймовірність виявити частинку в середній третині ями (тобто в інтервалі $\frac{L}{3} \leq x \leq \frac{2L}{3}$).

1.2. Перевірте, чи можуть бути хвильовими функціями деяких реальних квантових станів на всій осі Ox ($-\infty < x < \infty$). такі функції:

а) $\psi(x) = A \operatorname{tg}(x)$;

б) $\psi(x) = A e^{-x^2}$;

в) $\psi(x) = \frac{A}{x}$. Обґрунтуйте відповідь, аналізуючи стандартні умови.

1.3. Стан частинки описується хвильовою функцією

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{x^2 + a^2}}, \text{ де } a \text{ — дійсна стала. Знайдіть нормувальну сталу}$$

A . (Підказка: використовуйте табличний інтеграл

$$\int \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{1}{a} \operatorname{arctg} \frac{x}{a}.$$

4. Задачі для самостійного опрацювання

1.4. Хвильова функція електрона в атомі водню в основному стані (1s-стан) має сферично симетричний вигляд:

$$\psi(r) = Ae^{-r/a_0}$$

де r — відстань від ядра, a_0 — борівський радіус ($a_0 \approx 0,53 \times 10^{-10}$ м). Використовуючи сферичну систему координат (елемент об'єму $dV = 4\pi r^2 dr$), знайдіть:

- Нормувальний коефіцієнт A .
- Відстань $r_{\max}$, на якій ймовірність виявити електрон у сферичному шарі є максимальною.

$$\text{Вказівка: інтеграл типу } \int_0^\infty r^n e^{-\beta r} dr = \frac{n!}{\beta^{n+1}}.$$

$$\text{Відповідь: } A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \quad r_{\max} = a_0.$$

1.5. Одновимірна хвильова функція задана виразом:

$$\psi(x) = \begin{cases} Axe^{-\beta x}, & x \geq 0 \quad (\beta > 0) \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

Знайдіть дійсну нормувальну сталу A .

Відповідь: $A = 2\beta^{3/2}$.

1.6. Вільна частинка масою m рухається в одновимірному просторі. Її хвильова функція у початковий момент часу $t = 0$ має вигляд:

$$\psi(x, 0) = A e^{ik_0 x} e^{-x^2/(2\sigma^2)}$$

де k_0 та σ — дійсні сталі. Знайдіть нормувальний коефіцієнт

A . (Підказка: інтеграл Пуассона $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$).

• **Відповідь:** $A = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}}$.

5. Запитання для самоконтролю

1. Чому сама хвильова функція $\Psi(x, t)$ не може бути безпосередньо виміряна на досліді, на відміну від класичних полів (наприклад, електромагнітного)?

2. Яка відмінність між поняттями «ймовірність» та «густина ймовірності» у квантовій механіці? Які їхні одиниці вимірювання в системі SI в одновимірному та тривимірному випадках?

3. Чому до хвильової функції висуваються вимоги неперервності та скінченності? Які б наслідки для фізичних вимірювань мав розрив функції в якійсь точці?

4. У чому полягає математична суть нормування хвильової функції? Чи зміниться фізичний стан системи, якщо

хвильову функцію помножити на довільне комплексне число

$$C = |C| e^{i\alpha} ?$$

5. Як формулюється принцип суперпозиції станів у квантовій механіці та які фізичні явища (наприклад, інтерференція мікрочастинок) він пояснює?

Практичне заняття №2. Середні значення фізичних величин та оператори в квантовій механіці. Комутатори операторів координат та імпульсу.

Мета: Ознайомити студентів з операторним методом у квантовій механіці; навчити будувати квантово-механічні оператори для різних фізичних величин, обчислювати їхні середні значення в заданих станах та аналізувати некомутативність операторів як основу квантової специфіки вимірювань.

1. Теоретичний мінімум та базові формули

У квантовій механіці кожній фізичній величині F ставиться у відповідність лінійний самоспряжений (ермітів) оператор $\hat{F}$.

Основні оператори координати та імпульсу (в координатному представленні):

– **Оператор координати $\hat{x}$** зводиться до множення на саму координату:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

– **Оператор імпульсу $\hat{\vec{p}}$** (у тривимірному просторі) та його проєкції на осі координат:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Оператори інших фізичних величин (будуються на основі їх класичних виразів):

– **Оператор кінетичної енергії $\hat{T}$** :

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

– **Оператор потенціальної енергії $\hat{U}$** :

$$\hat{U} = U(x, y, z)$$

– **Оператор повної енергії (Гамільтоніан) $\hat{H}$** :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)$$

Середнє значення фізичної величини

У стані, який описується нормованою хвильовою функцією $\Psi(\vec{r}, t)$, середнє значення фізичної величини F (результат усереднення великої серії однакових вимірювань) розраховується за формулою:

$$\langle F \rangle = \int_{(V)} \Psi^* \hat{F} \Psi dV$$

Для одновимірного руху вздовж осі Ox :

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{F} \psi(x) dx$$

Комутатори операторів

Математичною мірою одночасної вимірюваності двох фізичних величин є їхній **комутатор** $[\hat{A}, \hat{B}]$:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Якщо $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, оператори комутують. Це означає, що відповідні фізичні величини можуть одночасно мати точні й визначені значення. Якщо $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, величини не можуть бути виміряні одночасно з абсолютною точністю.

Фундаментальне комутаційне співвідношення між координатою та імпульсом:

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

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Доведення фундаментального комутатора.

Доведіть комутаційне співвідношення для операторів координати та проекції імпульсу: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$.

Розв'язання: Щоб знайти значення комутатора операторів, подіємо ним на довільну допоміжну (пробну) диференційовану функцію $\psi(x)$:

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

Підставимо явний вигляд операторів $\hat{x} = x$ та $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$:

$$\hat{x}(\hat{p}_x \psi(x)) = x \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx}$$

Тепер знайдемо дію другого добутку операторів. Зверніть увагу, що тут оператор диференціювання діє на добуток двох функцій змінної x — власне саму координату x та функцію $\psi(x)$, тому застосуємо правило диференціювання добутку $(uv)' = u'v + uv'$:

$$\hat{p}_x(\hat{x}\psi(x)) = -i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi(x)) = -i\hbar \left(\frac{dx}{dx}\psi(x) + x \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar \psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx}$$

Тепер віднімемо другий вираз від першого:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} - \left(-i\hbar \psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx} \right)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \psi(x) + i\hbar x \frac{d\psi}{dx} = i\hbar \psi(x)$$

Оскільки допоміжна функція $\psi(x)$ була вибрана довільно, ми можемо опустити її в лівій та правій частинах рівності, одержавши операторну тотожність:

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

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

Задача 2. Обчислення середніх значень координати.

Частинка перебуває в основному стані в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 \leq x \leq L$). Хвильова функція цього стану має вигляд:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Знайдіть середнє значення координати $\langle x \rangle$ та середнє значення квадрата координати $\langle x^2 \rangle$.

Розв'язання:

1. Знаходження середнього значення координати $\langle x \rangle$: За загальною формулою середнього значення:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_0^L \psi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot x \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \\ \langle x \rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \end{aligned}$$

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

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

Перший інтеграл: $\int_0^L x dx = \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^L = \frac{L^2}{2}$. Другий інтеграл

обчислимо інтегруванням частинами ($\int u dv = uv - \int v du$): Нехай

$$u = x \Rightarrow du = dx; dv = \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx \Rightarrow v = \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right).$$

$$\int_0^L x \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \left[x \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right]_0^L - \int_0^L \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$$

Оскільки $\sin(2\pi) = 0$ та $\sin(0) = 0$, перший доданок дорівнює нулю. Інтеграл від синуса по повному періоду також дорівнює нулю. Отже, весь другий інтеграл дорівнює 0. Отримуємо:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{L} \left[\frac{L^2}{2} - 0 \right] = \frac{L}{2}$$

Фізичний зміст результату: Цей результат є цілком очевидним з міркувань симетрії: у симетричній ямі середня координата знаходження частинки розташована точно посередині ями.

2. Знаходження середнього значення квадрата координати

$\langle x^2 \rangle$:

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

Перший інтеграл: $\int_0^L x^2 dx = \frac{L^3}{3}$. Другий інтеграл обчислимо

двократним інтегруванням частинами:

$$\int_0^L x^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{L^3}{2\pi^2}$$

Підставимо отримані інтеграли:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{L} \left[\frac{L^3}{3} - \frac{L^3}{2\pi^2} \right] = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right) \approx 0,283L^2$$

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

3. Задачі для аудиторної роботи

2.1. Знайдіть середнє значення імпульсу $\langle p_x \rangle$ та квадрата імпульсу $\langle p_x^2 \rangle$ для частинки в прямокутній потенціальній ямі з

хвильовою функцією $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$. *Методична вказівка:*

пам'ятайте, що оператор квадрата імпульсу має вигляд

$$\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}.$$

2.2. Обчисліть комутатор оператора координати та оператора кінетичної енергії в одновимірному просторі: $[\hat{x}, \hat{T}]$. *(Підказка:*

розпишіть $\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ *та використайте тотожність*

$$[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}].$$

2.3. Доведіть, що оператор проєкції моменту імпульсу на вісь Oz, який в циліндричних координатах має вигляд $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, є ермітовим (самоспряженим). *Критерій ермітовості оператора:*

$$\int_0^{2\pi} f^{(\varphi)}(\hat{L}_z g(\varphi)) d\varphi = \int_0^{2\pi} (\hat{L}_z f(\varphi))^* g(\varphi) d\varphi.$$

4. Задачі для самостійного опрацювання

2.4. Стан частинки на осі Oх описується нормованою хвильовою функцією $\psi(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-x^2/(2\sigma^2)}$. Обчисліть середнє значення координати $\langle x \rangle$ та середній квадрат координати $\langle x^2 \rangle$.

Відповідь: $\langle x \rangle = 0$; $\langle x^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{2}$.

2.5. Для стану з попередньої задачі (2.4) знайдіть середнє значення імпульсу $\langle p_x \rangle$ та середній квадрат імпульсу $\langle p_x^2 \rangle$.

• **Відповідь:** $\langle p_x \rangle = 0$; $\langle p_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}$.

2.6. Знайдіть комутатори операторів:

а) $[\hat{p}_x, \hat{x}^2]$;

б) $[\hat{x}, \hat{p}_y]$.

Відповідь: а) $-2i\hbar x$; б) 0 (координата по одній осі та імпульс по іншій комутують).

5. Запитання для самоконтролю

1. Що таке лінійний самоспряжений оператор фізичної величини? Чому вимоги лінійності та самоспряженості є обов'язковими для квантових операторів?

2. Яким фізичним станам відповідають дійсні власні значення операторів?

3. Чому середнє значення імпульсу $\langle p_x \rangle$ для локалізованих станів (наприклад, у потенціальній ямі або для гаусового пакета) дорівнює нулю? Який у цьому фізичний зміст?

4. Які фізичні величини називаються сумісними, а які — несумісними? Як це пов'язано з комутацією відповідних операторів?

5. Опишіть фізичний зміст некомутованості операторів координати та імпульсу з погляду проведення реальних вимірювань у фізичній лабораторії.

1.3. Практичне заняття №3. Рівняння на власні функції та власні значення. Властивості дискретного та неперервного

Мета: Навчитися складати та розв'язувати рівняння на власні функції та власні значення для основних квантово-механічних операторів; опанувати математичні методи роботи з дискретними й неперервними спектрами; зрозуміти фізичний зміст розкладу довільного стану за повним набором власних функцій.

1. Теоретичний мінімум та базові формули

Рівняння на власні значення

Якщо дія оператора $\hat{A}$ на хвильову функцію ψ зводиться до множення цієї функції на постійне число a :

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

то таке рівняння називається **рівнянням на власні значення** (або рівнянням на власні функції).

- Функція ψ називається **власною функцією** оператора $\hat{A}$.
- Число a називається **власним значенням** оператора $\hat{A}$, що відповідає даній власній функції.

Множина всіх можливих власних значень оператора називається його **спектром**.

Дискретний та неперервний спектри

1. **Дискретний спектр:** Власні значення утворюють послідовність ізольованих чисел $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$. Власні функції дискретного спектра описують зв'язані (локалізовані) стани системи. Вони задовольняють стандартну умову нормування та властивість **ортонормованості**:

$$\int \psi_n^* \psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$$

де δ_{nm} — символ Кронекера.

2. **Неперервний (безперервний) спектр:** Власні значення заповнюють суцільний інтервал (наприклад, енергія чи імпульс вільної

частинки). Власні функції дефініюють делокалізовані стани й нормуються на **дельта-функцію Дірака** $\delta(k - k')$:

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dV = \delta(k - k')$$

Принцип суперпозиції та розклад за власними функціями

Будь-яку хвильову функцію ψ , що описує довільний стан системи, можна розкласти у ряд (або інтеграл) за повним набором власних функцій ψ_n оператора $\hat{A}$:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

де коефіцієнти розкладу c_n обчислюються через інтеграл перекриття:

$$c_n = \int \psi_n^* \psi dV$$

Фізичний зміст коефіцієнтів c_n :

– Величина $P_n = |c_n|^2$ визначає ймовірність того, що в стані ψ вимірювання фізичної величини A дасть результат, який дорівнює власному значенню a_n .

– Умова нормування для коефіцієнтів: $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

– Середнє значення величини A у стані ψ виражається як: $\langle A \rangle = \sum_n a_n |c_n|^2$.

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Власні функції та неперервний спектр імпульсу.

Знайдіть власні значення та власні функції оператора проекції імпульсу $\hat{p}_x$ на нескінченній одновимірній осі Ox . Проведіть нормування на δ -функцію.

Розв'язання: Запишемо оператор проекції імпульсу:

$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Рівняння на власні значення $\hat{p}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x)$ набуває вигляду:

$$-i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p \psi_p(x)$$

Розділимо змінні в цьому диференціальному рівнянні першого порядку:

$$\frac{d\psi_p}{\psi_p} = \frac{ip}{\hbar} dx$$

Інтегруючи обидві частини, знаходимо загальний розв'язок:

$$\ln \psi_p = \frac{ip}{\hbar} x + \ln C \Rightarrow \psi_p(x) = C e^{\frac{ip}{\hbar} x}$$

Оскільки рух відбувається на нескінченній осі, власне значення p може набувати будь-яких дійсних значень від $-\infty$ до $+\infty$ (спектр є безперервним). Для комплексних p функція б необмежено зростала на нескінченності, що суперечить вимогам скінченності хвильової функції.

Знайдемо сталу C з умови нормування на δ -функцію:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) dx = \delta(p - p')$$

$$C^* C \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip'}{\hbar}x} e^{\frac{ip}{\hbar}x} dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(p-p')}{\hbar}x} dx = \delta(p - p')$$

Зробимо заміну змінної $y = x / \hbar \Rightarrow dx = \hbar dy$:

$$|C|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')y} dy = \delta(p - p')$$

Використаємо математичне представлення δ -функції Дірака

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iky} dy = 2\pi\delta(k):$$

$$|C|^2 \hbar \cdot 2\pi\delta(p - p') = \delta(p - p') \Rightarrow 2\pi\hbar |C|^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Відповідь: Власні значення p утворюють суцільний спектр ($p \in \mathbb{R}$). Нормовані власні функції мають вигляд:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip}{\hbar}x}$$

Задача 2. Власні функції та дискретний спектр моменту імпульсу.

Знайдіть власні значення та власні функції оператора проекції моменту імпульсу на вісь Oz: $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

Розв'язання: Рівняння на власні значення $\hat{L}_z \psi(\varphi) = L_z \psi(\varphi)$ має вигляд:

$$-i\hbar \frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} = L_z \psi(\varphi)$$

Розв'язуючи це рівняння аналогічно до Попередньої задачі, отримуємо:

$$\psi(\varphi) = C e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$$

У квантовій механіці кутова координата φ визначає положення в просторі, тому фізичні стани через повний оберт мають повністю збігатися. Застосуємо **умову однозначності** хвильової функції:

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

Поділивши обидві частини на $C e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$, отримаємо:

$$e^{i \frac{L_z}{\hbar} 2\pi} = 1$$

Згідно з формулою Ейлера ($e^{i\alpha} = 1$ тільки якщо $\alpha = 2\pi m$, де $m \in \mathbb{Z}$):

$$\frac{L_z}{\hbar} 2\pi = 2\pi m \Rightarrow L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Таким чином, спектр проекції моменту імпульсу є **дискретним** (квантованим).

Нормуємо отриману функцію на інтервалі зміни полярного кута $[0, 2\pi]$:

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow C^2 \int_0^{2\pi} 1 \cdot d\varphi = 1 \Rightarrow 2\pi C^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Відповідь: Власні значення квантовані: $L_z = m\hbar$ ($m \in \mathbb{Z}$).

Нормовані власні функції:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Методична порада для вчителя: Ця задача є ідеальним прикладом того, як природна вимога однозначності хвильової функції у просторі безпосередньо зумовлює явище дискретності (квантування) фізичних величин без залучення додаткових штучних постулатів.

3. Задачі для аудиторної роботи

3.1. Знайдіть власні значення та власні функції оператора

квадратного модуля імпульсу $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$ для частинки, що

локалізована в одновимірній області $0 \leq x \leq L$, якщо на межах області хвильова функція перетворюється на нуль: $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

3.2. Оператор $\hat{A}$ має дискретні власні значення $a_1 = 1$, $a_2 = 2$, $a_3 = 3$ та відповідні ортонормовані власні функції ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 . Стан системи описується функцією:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2 + c_3 \psi_3$$

- Знайдіть значення коефіцієнта c_3 (вважаючи його дійсним та додатним) з умови нормування.
- Визначте ймовірності виявлення значень a_1, a_2, a_3 при вимірюванні величини A .
- Обчисліть середнє значення $\langle A \rangle$ у цьому стані.

3.3. Перевірте, чи є функція $\psi(x) = Ae^{-\alpha^2 x^2}$ власною функцією оператора $\hat{B} = \frac{d^2}{dx^2} - 4\alpha^4 x^2$. Якщо так, визначте відповідне власне значення.

4. Задачі для самостійного опрацювання

3.4. Доведіть, що власні функції лінійного самоспряженого (ермітового) оператора, які відповідають різним власним значенням дискретного спектра ($a_n \neq a_m$), є ортогональними: $\int \psi_n^* \psi_m dV = 0$.

3.5. Знайдіть власні значення оператора $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ на інтервалі $(-\infty, \infty)$. Які обмеження накладає вимога скінченності хвильових функцій на спектр цього оператора?

Відповідь: Спектр суто уявний: $a = ik$, де $k \in \mathbb{R}$. Власні функції $\psi_k(x) = Ce^{ikx}$.

3.6. Квантова система перебуває у стані, що описується хвильовою функцією $\psi(\varphi) = A \sin^2 \varphi$ на інтервалі $[0, 2\pi]$. Розкладіть

цей стан за власними функціями оператора $\hat{L}_z$ (див. Задача 2) та визначте ймовірності можливих значень проекції моменту імпульсу.

Вказівка: розпишіть $\sin^2 \varphi$ через комплексні експоненти:

$$\sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}.$$

Відповідь: Можливі значення L_z : 0 (з ймовірністю $2/3$), $+2\hbar$ (з ймовірністю $1/6$) та $-2\hbar$ (з ймовірністю $1/6$).

5. Запитання для самоконтролю

1. Що визначають поняття "власна функція" та "власне значення" оператора? Наведіть приклади з класичної математики (наприклад, оператор диференціювання).
2. Чому спектр власних значень координати вільної частинки є безперервним, а координати частинки у закритій коробці — обмеженим?
3. Які математичні та фізичні вимоги висувають до власних функцій операторів у квантовій механіці?
4. У чому полягає відмінність між нормуванням функцій дискретного спектра та нормуванням функцій безперервного спектра?
5. Поясніть фізичний зміст принципу суперпозиції станів на основі коефіцієнтів розкладу c_n . Що показує сума їх квадратів модулів $\sum |c_n|^2 = 1$?

Практичне заняття №4. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Оцінка енергії основних станів мікросистем.

Мета: Опанувати концепцію квантових флуктуацій та статистичного опису вимірювань; навчитися розраховувати квантово-механічні невизначеності (середньоквадратичні відхилення) фізичних величин; опанувати метод оцінки енергії та просторових масштабів основних станів квантових систем на основі співвідношення Гейзенберга.

1. Теоретичний мінімум та базові формули

Визначення квантової невизначеності

У квантовій механіці невизначеність ΔA вимірювання фізичної величини A в заданому стані визначається як середньоквадратичне відхилення від її середнього значення:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

де $\langle A \rangle$ — середнє значення величини, а $\langle A^2 \rangle$ — середнє значення її квадрата у досліджуваному стані.

Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Для будь-якої пари фізичних величин, оператори яких не комутують, існує фундаментальне обмеження на точність їх одночасного вимірювання.

1. Для координати та імпульсу (співвідношення Гейзенберга):

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

Аналогічні співвідношення виконуються для інших декартових проекцій: $\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$.

2. Для енергії та часу:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

де ΔE — невизначеність енергії квантового стану (ширина енергетичного рівня), а Δt — характерний час перебування системи в цьому стані (час життя збудженого стану).

Метод оцінки параметрів основного стану

Співвідношення невизначеностей дає змогу оцінювати порядок величини енергії основного стану E_0 та просторових розмірів мікросистем без розв'язання рівняння Шредінгера.

Для цього роблять такі наближення (оцінки порядку величин):

1. Припускають, що розмір області локалізації частинки становить r (або x), тоді невизначеність координати $\Delta x \sim r$.

2. Згідно із співвідношенням Гейзенберга, мінімальний імпульс частинки (та невизначеність імпульсу) становить:

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{r}.$$

3. Записують повну енергію системи як функцію розміру r :

$$E(r) = T(r) + U(r) \approx \frac{p^2}{2m} + U(r) \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} + U(r)$$

4. Знаходять мінімум функції $E(r)$ за параметром r (умова $\frac{dE}{dr} = 0$). Отримане значення r_0 дає оцінку ефективного розміру системи в основному стані, а $E(r_0)$ — оцінку енергії цього стану.

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Перевірка співвідношення невизначеностей для гаусового пакета.

Доведіть, що для стану, який описується нормованою хвильовою функцією $\psi(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-x^2/(2\sigma^2)}$, добуток невизначеностей набуває абсолютно мінімального значення:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}.$$

Розв'язання: Знайдемо спочатку невизначеність координати $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. З Практичного заняття №2 (задача 2.4) відомі середні значення для цього стану:

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{2}$$

Отже, невизначеність координати дорівнює:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2} - 0} = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$$

Тепер знайдемо невизначеність імпульсу $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$

. З Практичного заняття №2 (задача 2.5) маємо:

$$\langle p_x \rangle = 0, \quad \langle p_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}$$

Отже, невизначеність імпульсу становить:

$$\Delta p_x = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\sigma^2} - 0} = \frac{\hbar}{\sigma\sqrt{2}}$$

Обчислимо добуток невизначеностей координати та імпульсу:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar}{\sigma\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

Фізичний зміст результату: Стан, що описується гаусовою хвильовою функцією (його називають когерентним станом або мінімальним хвильовим пакетом), забезпечує гранично високу точність вимірювання координати та імпульсу, яка тільки допускається законами квантової природи.

Задача 2. Оцінка параметрів атома водню.

Користуючись співвідношенням невизначеностей Гейзенберга, оцініть радіус r_0 та енергію E_0 основного стану атома водню.

Розв'язання: Електрон масою m утримується поблизу протона кулонівською силою притягання. Потенціальна енергія взаємодії становить (в системі SI):

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

де r — відстань між електроном та протоном (ефективний радіус атома).

Якщо електрон локалізований в області радіуса r , невизначеність його координати $\Delta x \sim r$. Згідно із співвідношенням невизначеностей, середній імпульс електрона не може бути меншим за:

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{r}$$

$$\text{Тоді кінетична енергія електрона дорівнює } T = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2}.$$

Запишемо повну енергію системи як функцію від r :

$$E(r) = T(r) + U(r) = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Знайдемо значення r_0 , при якому енергія мінімальна.

Продиференціюємо функцію за змінною r та прирівняємо похідну до нуля:

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{2\hbar^2}{2mr^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = 0$$

Поділимо обидві частини рівняння на $1/r^2$:

$$\frac{\hbar^2}{mr_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \Rightarrow r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

Отриманий вираз для r_0 точно збігається з першим борівським радіусом атома водню ($r_0 \approx 0,53 \times 10^{-10} \text{ м} = 0,53 \text{ Å}$). Знайдемо значення мінімальної енергії системи, підставивши r_0 у вираз для $E(r)$:

$$E_0 = E(r_0) = \frac{\hbar^2}{2m \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \right)^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \right)} = \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} - \frac{me^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

$$E_0 = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx -13,6 \text{ eV}$$

Відповідь: Оцінка дає ефективний радіус $r_0 \approx 0,53 \text{ Å}$ та енергію основного стану $E_0 \approx -13,6 \text{ eV}$, що блискуче узгоджується з експериментальними даними спектроскопії.

Методична порада для вчителя: Цей розв'язок наочно пояснює учням фундаментальне питання: «Чому електрон не падає на позитивно заряджене ядро під дією кулонівських сил?». Якщо електрон наблизиться до ядра на надмалу відстань ($r \rightarrow 0$), його імпульс і, відповідно, кінетична енергія локалізації різко зростуть за законом $T \propto 1/r^2$. Це виштовхне електрон назад. Стабільний стан атома — це компроміс між намаганням кулонівського поля притягнути електрон і квантовим «опором» стисненню.

3. Задачі для аудиторної роботи

4.1. Обчисліть добуток невизначеностей $\Delta x \cdot \Delta p_x$ для частинки в одновимірній квантовій ямі нескінченної глибини шириною L в основному стані ($n=1$). Хвильова функція стану:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) . \quad \text{Методична вказівка: скористайтеся}$$

результатами обчислення середніх значень з Практичного заняття №2.

4.2. Знайдіть за допомогою співвідношення Гейзенберга мінімальну енергію E_{min} лінійного гармонійного осцилятора, потенціальна енергія якого має вигляд $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

4.3. Оцініть мінімальну кінетичну енергію електрона, який локалізований всередині атомного ядра (приблизний розмір ядра $R \approx 10^{-14}$ м). Зробіть висновок про можливість перебування вільних електронів у складі ядра.

4. Задачі для самостійного опрацювання

4.4. Визначте природну ширину спектральної лінії випромінювання атома $\Delta\lambda$ при переході з першого збудженого стану в основний. Довжина хвилі випромінювання становить $\lambda = 600$ нм, а середній час життя збудженого стану дорівнює $\tau \approx 10^{-8}$ с.

Вказівка: Зв'язок між невизначеністю частоти та енергії:

$\Delta E = \hbar \Delta \omega = \hbar \Delta \nu$. Диференціюючи вираз $\nu = c / \lambda$, маємо

$$\Delta \nu \approx \frac{c}{\lambda^2} \Delta \lambda .$$

Відповідь: $\Delta \lambda \approx \frac{\lambda^2}{2\pi c \tau} \approx 1,9 \times 10^{-14} \text{ м} = 19 \text{ фм} .$

4.5. Розрахуйте та порівняйте невизначеність швидкостей:

а) порошинки масою $m = 10^{-12} \text{ кг}$, якщо положення її центру мас визначено з точністю $\Delta x = 10^{-9} \text{ м}$;

б) вільного електрона при тій самій невизначеності координати.

Відповідь: а) $\Delta v \geq 5,3 \times 10^{-14} \text{ м/с}$ (невизначеністю можна знехтувати); б) $\Delta v \geq 5,8 \times 10^4 \text{ м/с}$ (значення є суттєвим у масштабах мікросвіту).

4.6. За допомогою співвідношення невизначеностей оцініть силу, яку необхідно прикласти, щоб утримати стиснену пружину, якщо на її кінці закріплена частинка масою m у стані з мінімальною енергією.

5. Запитання для самоконтролю

1. Сформулюйте та фізично прокоментуйте принцип невизначеності Гейзенберга. Чому він є фундаментальним обмеженням природи, а не недоліком вимірювальних приладів?

2. Як зміниться невизначеність імпульсу частинки, якщо область її локалізації зменшити вдвічі?

3. Чому у класичній механіці енергія основного стану осцилятора дорівнює нулю, а у квантовій механіці вона має ненульове значення («нульові коливання»)?

4. Поясніть фізичний зміст співвідношення невизначеностей «енергія — час». Як воно впливає на реальні оптичні спектри атомів?

5. Які методичні прийоми ви б використали на уроці фізики в 11 класі, щоб наочно продемонструвати учням ідею квантового співвідношення невизначеностей?

Практичне заняття №5. Часова та стаціонарна форми рівняння Шредінгера. Рівняння безперервності та густина току ймовірності.

Мета: Опанувати фундаментальне рівняння руху квантової механіки — рівняння Шредінгера; навчитися здійснювати розділення змінних для стаціонарних станів; вивчити закон збереження ймовірності, навчитися розраховувати густину току ймовірності для різних квантових станів та аналізувати їхній фізичний зміст.

1. ТЕОРЕТИЧНИЙ МІНІМУМ ТА БАЗОВІ ФОРМУЛИ

Часове рівняння Шредінгера

Динаміка стану квантової системи (зміна хвильової функції з часом) визначається **часовим рівнянням Шредінгера**:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

де $\hat{H}$ — оператор повної енергії системи (Гамільтоніан). Для однієї частинки масою m , яка рухається в зовнішньому потенційному полі $U(\vec{r}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi$$

Стаціонарне рівняння Шредінгера

Якщо потенціальна енергія не залежить від часу явно ($U = U(\vec{r})$), то Гамільтоніан є консервативним. У цьому випадку рівняння Шредінгера має частинні розв'язки, у яких залежність від координат і часу розділяється:

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

де E — повна енергія частинки. При цьому просторова частина хвильової функції $\psi(\vec{r})$ задовольняє **стаціонарне рівняння Шредінгера**:

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

Стани, що описуються такими хвильовими функціями, називаються **стаціонарними**. У цих станах густина ймовірності $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$ та середні значення всіх фізичних величин не залежать від часу.

Рівняння безперервності та густина току ймовірності

Оскільки частинка не може зникнути або виникнути нізвідки, повна ймовірність знайти її у просторі зберігається з часом.

Локальний закон збереження ймовірності виражається **рівнянням безперервності** (аналогічним до рівняння безперервності в гідродинаміці та електродинаміці):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

де:

$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ — густина ймовірності;

$\vec{j}$ — вектор **густини току ймовірності**, який визначає напрямок та величину переносу ймовірності в одиницю часу через одиничну площину:

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

В одновимірному випадку (рух вздовж осі Ox) рівняння безперервності має вигляд:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0$$

де проекція густини току ймовірності j_x обчислюється як:

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

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Ток ймовірності для вільної частинки.

Знайдіть густину току ймовірності j_x для вільної частинки, що рухається в додатному напрямку осі Ox зі сталим імпульсом $p = \hbar k$. Стан частинки описується хвилею де Бройля:

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

Розв'язання: Знайдемо комплексно-спряжену функцію $\Psi^*(x, t)$ та похідну по координаті:

$$\Psi^*(x, t) = A^* e^{-i(kx - \omega t)} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik A e^{i(kx - \omega t)}$$

Підставимо ці вирази у формулу для одновимірного току ймовірності:

$$j_x = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(A^* e^{-i(kx - \omega t)} \cdot ik A e^{i(kx - \omega t)} \right)$$

Оскільки $e^{-i(kx - \omega t)} \cdot e^{i(kx - \omega t)} = 1$, а $A^* A = |A|^2$, отримаємо:

$$j_x = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} (ik |A|^2)$$

Оскільки k та $|A|^2$ — дійсні величини, то уявна частина комплексного числа $ik |A|^2$ дорівнює просто $k |A|^2$:

$$j_x = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

Аналіз та фізичний зміст результату: Згадаємо, що $\hbar k = p = mv$, де v — класична швидкість частинки. Тоді:

$$j_x = v |A|^2 = v \rho$$

Цей результат має очевидний фізичний зміст, повністю аналогічний класичному: густина току дорівнює добутку швидкості руху частинки на густину її розподілу в просторі.

Розв’язання: Запишемо повну часову хвильову функцію для стаціонарного стану:

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

Її комплексно-спряжена функція має вигляд:

$$\Psi^*(x, t) = \psi^*(x) e^{i \frac{E}{\hbar} t} = \psi(x) e^{i \frac{E}{\hbar} t} \quad (\text{і} \nabla^2 \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x))$$

Підставимо ці функції у формулу для густини току ймовірності:

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

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi(x) e^{i \frac{E}{\hbar} t} \right] - \psi(x) e^{i \frac{E}{\hbar} t} \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \right] \right)$$

Оскільки диференціювання здійснюється по координаті x , часові експоненти можна винести за знак похідної:

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} e^{i \frac{E}{\hbar} t} \frac{d\psi}{dx} - \psi(x) e^{i \frac{E}{\hbar} t} e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \frac{d\psi}{dx} \right)$$

Оскільки $e^{-i \frac{E}{\hbar} t} e^{i \frac{E}{\hbar} t} = 1$, отримуємо:

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x) \frac{d\psi}{dx} - \psi(x) \frac{d\psi}{dx} \right) = 0$$

Фізичний зміст результату: У стаціонарних станах, які описуються дійсними хвильовими функціями (наприклад, стан частинки у прямокутній потенціальній ямі: $\psi(x) \propto \sin(kx)$), просторового перенесення ймовірності не відбувається. Це квантовий аналог **стоячої хвилі**, у якій коливання відбуваються, але енергія (або речовина) не переноситься в просторі.

Методична порада для вчителя: Цей висновок надзвичайно корисний при викладанні теми "Будова атома". Студентам (і майбутнім учням) важливо пояснити, що електрони на стаціонарних орбітах в атомі Водню (які описуються дійсними функціями) перебувають у стані "стоячих хвиль", тому немає макроскопічного руху заряду вздовж радіуса, і електрон не випромінює електромагнітну енергію, що розв'язує парадокс планетарної моделі Резерфорда.

3. Задачі для аудиторної роботи

5.1. Стан частинки описується хвильовою функцією у вигляді суперпозиції двох хвиль, що біжать у протилежних напрямках:

$$\Psi(x, t) = \left(A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right) e^{-i\omega t}$$

де A та B — комплексні амплітуди. Обчисліть густину току ймовірності j_x .

Відповідь: $j_x = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$. Проаналізуйте отриманий вираз (рух у протилежні сторони).

5.2. Знайдіть густину току ймовірності для частинки, стан якої описується хвильовою функцією:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-ax^2} e^{-i\omega t}, \quad a > 0$$

Методична вказівка: зверніть увагу на те, чи є просторова частина функції дійсною.

4. Задачі для самостійного опрацювання

5.3. Сферично симетрична розбіжна хвиля описується хвильовою функцією:

$$\Psi(r, t) = \frac{A}{r} e^{i(kr - \omega t)}$$

Визначте радіальну проекцію густини току ймовірності j_r .

Вказівка: у сферичних координатах радіальна проекція градієнта

дорівнює $(\nabla\Psi)_r = \frac{\partial\Psi}{\partial r}$.

Відповідь: $j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|A|^2}{r^2}$. Проаналізуйте, чому ток зменшується

обернено пропорційно квадрату відстані r^2 від джерела.

5.4. Частинка масою m перебуває у стані з хвильовою функцією:

$$\Psi(x, t) = Ce^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{ik_0 x} e^{-i\omega t}$$

де C , σ , k_0 — дійсні сталі. Знайдіть густину току ймовірності $j_x(x)$.

Відповідь:
$$j_x(x) = \frac{\hbar k_0}{m} |C|^2 e^{-x^2/\sigma^2} = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x).$$

5.5. Доведіть, що стаціонарне рівняння Шредінгера завжди можна звести до системи рівнянь для дійсних функцій, якщо потенціал $U(\vec{r})$ є дійсним.

5. Запитання для самоконтролю

1. У чому полягає відмінність між часовим та стаціонарним рівняннями Шредінгера? У яких випадках фізична система описується стаціонарним рівнянням?

2. Який фізичний зміст має рівняння безперервності у квантовій механіці? Закону збереження якої фізичної величини воно відповідає?

3. Чому вектор густини току ймовірності $\vec{j}$ залежить від градієнта фази хвильової функції? Що відбудеться, якщо фаза буде постійною у всьому просторі?

4. Спробуйте провести аналогію між густиною току ймовірності у квантовій фізиці та густиною електричного струму в класичній електродинаміці. Як вони взаємопов'язані для зарядженої мікрочастинки (наприклад, електрона)?

5. Як концепція хвильового пакета та рівняння безперервності допомагають унаочнити рух квантової частинки при її викладанні у профільному курсі фізики середньої школи?

Практичне заняття №6. Зміна середніх значень фізичних величин з часом. Рівняння руху для операторів (динаміка квантових станів).

Мета: Опанувати квантово-механічний опис еволюції систем у часі; навчитися знаходити похідну оператора за часом та розраховувати швидкість зміни середніх значень фізичних величин; вивчити теореми Еренфеста та концепцію квантових інтегралів руху.

1. Теоретичний мінімум та базові формули

Похідна оператора за часом та рівняння руху

У квантовій механіці стан системи змінюється з часом відповідно до часового рівняння Шредінгера. Продиференціювавши середнє значення фізичної величини $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$ за часом t , можна отримати загальне квантове **рівняння руху для середніх значень**:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

Для операторів, які явно не залежать від часу ($\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$), швидкість зміни їхнього середнього значення визначається виключно комутатором цього оператора з Гамільтоніаном $\hat{H}$ системи:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

За аналогією з класичною механікою, швидкість зміни самої операторної величини (у представленні Гейзенберга) визначається рівнянням руху:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]$$

Інтеграли руху

Фізична величина A називається **інтегралом руху** (або збережуваною величиною), якщо її середнє значення не змінюється з часом у будь-якому стані системи: $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$. Для цього необхідно й достатньо, щоб виконувалися дві умови:

1. Оператор величини не залежить від часу явно: $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$.
2. Оператор величини комутує з Гамільтоніаном системи:
 $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$.

У станах із визначеним значенням інтеграла руху відповідна фізична величина зберігає своє значення з часом абсолютно точно (її невизначеність $\Delta A = 0$).

Теореми Еренфеста

Теореми Еренфеста встановлюють безпосередній зв'язок між квантовою та класичною механікою. Вони стверджують, що середні значення координати та імпульсу квантової частинки змінюються з часом за законами, які формально збігаються з класичними рівняннями Гамільтона та другим законом Ньютона:

1. **Перша теорема Еренфеста** (зв'язок швидкості зміни середньої координати із середнім імпульсом):

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m}$$

2. **Друга теорема Еренфеста** (квантовий аналог другого закону Ньютона):

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle = \langle F_x \rangle$$

де $F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}$ — класична сила, що діє на частинку.

2. Приклади розв'язування типових задач

Задача 1. Доведення першої теореми Еренфеста.

Доведіть першу теорему Еренфеста $\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m}$ для одновимірного руху частинки масою m у довільному потенціальному полі $U(x)$.

Розв'язання: Оператор координати $\hat{x} = x$ явно не залежить від часу, тому $\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$. Тоді швидкість зміни середнього значення координати дорівнює:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle$$

Запишемо Гамільтоніан одновимірної частинки:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x). \text{ Знайдемо комутатор } [\hat{x}, \hat{H}]:$$

$$[x, \hat{H}] = \left[x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x) \right] = \left[x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] + [x, U(x)]$$

Оскільки оператор координати x та оператор потенціальної енергії $U(x)$ є просто функціями координати, вони комутують між собою, тобто $[x, U(x)] = 0$. Для обчислення комутатора з кінетичною енергією використаємо тотожність $[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}]$ та відомий комутатор $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$:

$$\begin{aligned} \left[x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] &= \frac{1}{2m} [x, \hat{p}_x^2] = \frac{1}{2m} ([x, \hat{p}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_x[x, \hat{p}_x]) \\ \left[x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] &= \frac{1}{2m} (i\hbar\hat{p}_x + \hat{p}_xi\hbar) = \frac{i\hbar\hat{p}_x}{m} \end{aligned}$$

Підставимо отримане значення комутатора у вираз для похідної за часом:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \frac{i\hbar\hat{p}_x}{m} \right\rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m}$$

Відповідь: Першу теорему Еренфеста доведено.

Задача 2. Закон збереження моменту імпульсу у центрально-симетричному полі.

Доведіть, що для частинки, яка рухається у центрально-симетричному полі $U(\vec{r}) = U(r)$ (де $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$), оператор

проекції моменту імпульсу на вісь Oz — $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ є

інтегралом руху.

Розв’язання: Оператор $\hat{L}_z$ не містить часу явно, тому

$\frac{\partial \hat{L}_z}{\partial t} = 0$. Перевіримо комутацію $\hat{L}_z$ з Гамільтоніаном

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r)$. Перейдемо у сферичну систему координат, де

оператор $\hat{L}_z$ та лапласіан Δ набувають особливо простого вигляду.

Як відомо з математичного аналізу:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Гамільтоніан у сферичних координатах записується через оператор квадрата кутового моменту $\hat{L}^2$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r)$$

де оператор $\hat{L}^2$ містить диференціювання лише по кутах θ та φ , а кутова частина $\hat{L}^2$ у сферичних координатах комутує з

диференціюванням по φ . Оскільки оператор $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

диференціює лише за полярним кутом φ , а радіальна частина лапласіана та потенціал $U(r)$ залежать виключно від радіуса r ,

оператор $\hat{L}_z$ комутує з усіма радіальними доданками Гамільтоніана. Також відомо, що будь-яка проекція моменту комутує з його квадратом: $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$.

Таким чином:

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle L_z \rangle = 0$$

Фізичний зміст результату: У центральному полі (наприклад, поле ядра в атомі водню) сила притягання спрямована вздовж радіус-вектора, тому крутний момент сили дорівнює нулю. Квантова теорія природно підтверджує цей класичний закон збереження: проекція моменту імпульсу (і сам вектор моменту) є інтегралом руху.

Методична порада для вчителя: Цей приклад показує студентам глибоку фундаментальність законів збереження. У класичній фізиці закон збереження моменту пов'язаний з ізотропією простору (симетрією відносно поворотів). У квантовій механіці цей самий закон реалізується через комутацію оператора повороту (яким є оператор кутового моменту) з оператором енергії системи.

3. Задачі для аудиторної роботи

6.1. Доведіть другу теорему Еренфеста $\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = - \left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle$.

Вказівка: обчисліть комутатор $[\hat{p}_x, \hat{H}] = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x) \right]$.

Пам'ятайте, що оператор імпульсу комутує з кінетичною енергією,

а для обчислення комутатора з потенціалом застосуйте його до пробної функції.

6.2. Знайдіть швидкість зміни середнього значення координати $\langle x \rangle$ та імпульсу $\langle p_x \rangle$ для одновимірного гармонійного осцилятора,

Гамільтоніан якого дорівнює $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Запишіть систему

рівнянь для середніх значень та розв'яжіть її.

6.3. Визначте, чи є імпульс частинки інтегралом руху, якщо вона рухається:

- а) у вільному просторі ($U = 0$);
- б) в однорідному полі тяжіння ($U = mgz$).

4. Задачі для самостійного опрацювання

6.4. Знайдіть закон зміни середнього значення координати з часом $\langle x(t) \rangle$ для вільної частинки ($U = 0$), якщо у початковий момент часу $t = 0$ середнє значення координати дорівнювало $\langle x \rangle_0$, а середній імпульс становив $\langle p_x \rangle_0$.

Відповідь: $\langle x(t) \rangle = \langle x \rangle_0 + \frac{\langle p_x \rangle_0}{m} t$. (Рух середньої точки

хвильового пакета повністю відповідає класичному рівномірному прямолінійному руху).

6.5. Доведіть, що для будь-якої консервативної системи (де Гамільтоніан явно не залежить від часу) повна енергія E є інтегралом руху.

Вказівка: обчисліть комутатор $[\hat{H}, \hat{H}]$.

6.6. Обчисліть похідну за часом від оператора кінетичної енергії $\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ частинки, яка рухається в полі з потенціалом $U(x)$.

Відповідь:
$$\frac{d\hat{T}}{dt} = -\frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \hat{p}_x \right).$$

5. Запитання для самоконтролю

1. Сформулюйте умови, за яких фізична величина є інтегралом руху в квантовій механіці. У чому полягає математичний критерій її збереження?

2. Який фізичний зміст мають теореми Еренфеста? За яких умов квантово-механічний рух частинки стає практично класичним?

3. Чому оператори координати та імпульсу, взагалі кажучи, не є інтегралами руху для частинки в потенційному полі?

4. Поясніть концепцію принципу відповідності Бора на прикладі одновимірного гармонійного осцилятора. Як переходять рівняння еволюції квантових середніх у класичні закони коливань вантажу на пружині?

5. Які наочні демонстрації або комп'ютерні моделі (наприклад, еволюцію хвильового пакета) ви можете запропонувати учням ліцею для пояснення переходу від квантового опису руху до класичних траєкторій?

МОДУЛЬ 2. НАЙПРОСТІШІ ЗАДАЧІ З КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

ТЕМА 7. Рух частинки в одновимірній прямокутній
потенціальній ямі нескінченної глибини

Базові формули:

Власні значення енергії: $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Власні хвильові функції:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad 0 \leq x \leq L$$

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 7.1.

Електрон перебуває в одновимірній прямокутній
потенціальній ямі нескінченної глибини шириною $L = 10^{-10}$ м
(умовний розмір атома). Обчисліть різницю енергій між першим
збудженим ($n = 2$) та основним ($n = 1$) станами електрона.
Відповідь виразіть в електрон-вольтах (еВ).

Вказівка: Скористайтесь формулою для E_n . Пам'ятайте,
що $1 \text{ \AA} = 1,6 \times 10^{-10}$ Дж. Маса електрона $m_e \approx 9,11 \times 10^{-31}$ кг.

Відповідь: $\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} \approx 113 \text{ \AA}.$

Задача 7.2.

Знайдіть точки в одновимірній потенціальній ямі шириною L , у яких густина ймовірності виявлення частинки для другого збудженого стану ($n = 3$) має:

- а) максимальне значення;
- б) мінімальне (нульове) значення (вузли хвильової функції).

Вказівка: Густина ймовірності описується функцією

$|\psi_3(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right)$. Знайдіть екстремуми цієї функції на інтервалі $[0, L]$

Задача 7.3.

Частинка в потенційній ямі нескінченної глибини шириною L перебуває в основному стані. Визначте ймовірність перебування частинки у лівій чверті ями (інтервал $0 \leq x \leq L/4$).

Вказівка: Обчисліть інтеграл $P = \int_0^{L/4} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$.

Скористайтеся формулою $\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos 2\alpha}{2}$.

Відповідь: $P = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \approx 0,091$ (9,1%).

Задача 7.4.

Знайдіть середнє значення кінетичної енергії $\langle T \rangle$

частинки масою m у стані, що описується функцією $\psi_n(x)$ у ямі шириною L .

Вказівка: Оскільки всередині ями потенціальна енергія $U = 0$, повна енергія дорівнює кінетичній. Відповідно, середнє значення кінетичної енергії має збігатися з власним значенням повної енергії E_n . Перевірте це інтегруванням:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \psi_n^*(x) \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} dx.$$

Відповідь: $\langle T \rangle = E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$

ТЕМА 8. Рух частинки в одновимірній симетричній потенціальній ямі скінченної глибини

Базові формули:

$$\text{Потенціал ями: } U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad (U_0 > 0)$$

$$\text{Умова зв'язаних станів: } -U_0 < E < 0.$$

Трансцендентні рівняння для енергетичного спектра:

$$\text{Парні стани: } \xi \operatorname{tg} \xi = \eta$$

$$\text{Непарні стани: } \xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta$$

Де $\xi = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E + U_0)}$, $\eta = \frac{a}{\hbar} \sqrt{-2mE}$, причому

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}.$$

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 8.1.

Якою має бути мінімальна глибина U_0 одновимірної прямокутної ями шириною $2a$, щоб у ній міг існувати принаймні один зв'язаний стан частинки масою m ?

Вказівка: Аналізуйте графічне розв'язання рівняння для парних станів $\xi \operatorname{tg} \xi = \eta$. Зверніть увагу, що перша гілка тангенса починається з нуля.

Відповідь: Для одновимірної симетричної ями навіть за як завгодно малої глибини ($U_0 > 0$) завжди існує щонайменше один дискретний енергетичний рівень (парний стан). Гранична мінімальна глибина $U_{0,min} = 0$.

Задача 8.2.

Знайдіть умову, за якої в одновимірній потенціальній ямі шириною $2a$ та глибиною U_0 виникає перший непарний (другий за порядком) стан частинки.

Вказівка: Непарні стани визначаються рівнянням

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta. \text{ Для існування розв'язку радіус кола } \sqrt{\xi^2 + \eta^2} = R$$

на площині (ξ, η) має бути більшим за координату першої асимптоти котангенса $\xi_1 = \pi / 2$.

Відповідь: $U_0 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$.

Задача 8.3.

Електрон рухається у ямі глибиною $U_0 = 10 \text{ \AA}$ та напівшириною $a = 2 \times 10^{-10} \text{ м}$. Оцініть характерну глибину проникнення δ електрона у класично заборонену область ($|x| > a$) для енергетичного рівня $E = -2 \text{ \AA}$.

Вказівка: Поза межами ями хвильова функція згасає за експоненціальним законом $\psi(x) \propto e^{-\kappa|x|}$, де $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

Характерна глибина проникнення (відстань, на якій функція зменшується в e разів) становить $\delta = 1 / \kappa$.

Відповідь: $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{-2m_e E}} \approx 1,38 \times 10^{-10} \text{ м} = 1,38 \text{ \AA}$.

ТЕМА 9. Рух квантової частинки в полі потенціального бар'єру. Ефект тунелювання

Базові формули:

Коефіцієнт проходження (прозорості) прямокутного бар'єру шириною a при енергії частинки $E < U_0$:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2(\kappa a)}, \quad \text{де } \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

При широкому або високому бар'єрі ($\kappa a \gg 1$):

$$D \approx D_0 e^{-2\kappa a}, \quad \text{де } D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}$$

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 9.1.

Частинка з енергією E налітає на прямокутний потенціальний потік (сходінку) висотою U_0 , причому $E > U_0$. Знайдіть коефіцієнт відбивання R частинки від цієї сходінки. Порівняйте з класичним результатом.

Вказівка: Хвильова функція ліворуч має вигляд

$$\psi_1 = e^{ik_1 x} + A e^{-ik_1 x}, \text{ праворуч } \psi_2 = B e^{ik_2 x}, \text{ де } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \text{ Знайдіть } A \text{ з умов неперервності функції та}$$

її похідної в точці $x = 0$. Коефіцієнт відбивання $R = |A|^2$.

$$\textbf{Відповідь: } R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2. \text{ На відміну}$$

від класичної фізики (де при $E > U_0$ частинка гарантовано

проходить, $R = 0$), у квантовій механіці існує ненульова ймовірність надбар'єрного відбивання.

Задача 9.2.

Протон та електрон з однаковими кінетичними енергіями $E = 1 \text{ \AA}$ підходять до прямокутного бар'єру висотою $U_0 = 2 \text{ \AA}$ та шириною $a = 10^{-10} \text{ м}$. Порівняйте коефіцієнти проходження D для цих частинок.

Вказівка: Розрахуйте κ_e та κ_p . Зверніть увагу, що маса протона $m_p \approx 1836m_e$. Застосуйте наближену формулу для великих бар'єрів.

Відповідь: Для електрона $D_e \approx 0,78$. Для протона через велику масу показник експоненти є дуже великим, тому $D_p \approx 10^{-19}$. Отже, ефект тунелювання є суттєвим лише для легких частинок (електронів).

Задача 9.3.

Якою має бути ширина прямокутного бар'єру a , щоб коефіцієнт проходження для електрона становив $D = 0,01$, якщо висота бар'єру $U_0 = 5 \text{ \AA}$, а енергія електрона $E = 1 \text{ \AA}$?

Вказівка: Обчисліть $\kappa = \frac{\sqrt{2m_e(U_0 - E)}}{\hbar}$. Скористайтесь

співвідношенням $\ln D \approx \ln D_0 - 2\kappa a$, знехтувавши слабою

залежністю D_0 порівняно з експонентою (або підставивши спочатку наближене значення $D_0 \approx 1$).

Відповідь: $a \approx \frac{\ln(1/D)}{2\kappa} \approx 2,2 \times 10^{-10} \text{ м} = 2,2 \text{ \AA}.$

ТЕМА 10. Лінійний гармонічний осцилятор в квантовій механіці

Базові формули:

Гамільтоніан: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

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

Хвильова функція основного стану ($n = 0$):

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 10.1.

Визначте енергію нульових коливань E_0 квантового осцилятора, якщо власна частота його класичних коливань становить $\nu = 10^{13} \text{ Гц}$ (типовий молекулярний масштаб). Чому дорівнює ця енергія в електрон-вольтах?

Вказівка: Скористайтесь формулою $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} h \nu$, де

$$h \approx 6,63 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Відповідь: $E_0 \approx 3,3 \times 10^{-21} \text{ Дж} \approx 0,02 \text{ еВ}.$

Задача 10.2.

Знайдіть координати точок x_{cl} , які обмежують область руху класичного гармонійного осцилятора з енергією, що дорівнює енергії квантового основного стану $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$. Порівняйте ці точки з точками перегину квантової хвильової функції $\psi_0(x)$.

Вказівка: Класичні межі руху визначаються з умови

$$E_0 = U(x) \Rightarrow \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{m \omega^2 x^2}{2}.$$
 Точки перегину графіка функції

$\psi_0(x)$ знаходяться з умови рівності нулю її другої похідної:

$$\frac{d^2 \psi_0}{dx^2} = 0.$$

Відповідь: Класичні межі руху повністю збігаються з

точками перегину хвильової функції: $x_{cl} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}.$

Задача 10.3.

Обчисліть середнє значення потенціальної енергії $\langle U \rangle$ квантового гармонійного осцилятора в основному стані $\psi_0(x)$.

Вказівка: Обчисліть інтеграл

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \left(\frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi_0(x) dx. \text{ Використайте табличний}$$

$$\text{інтеграл Пуассона } \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

$$\text{Відповідь: } \langle U \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega = \frac{1}{2} E_0 \text{ (згідно з теоремою віріалу,}$$

середня потенціальна енергія гармонійного осцилятора дорівнює середній кінетичній енергії і становить рівно половину повної енергії).

ТЕМА 11. Рух частинки в центральносиметричному полі.

Атом водню

Базові формули:

Власні значення енергії електрона в атомі водню:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{E_H}{n^2} \approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Спектральна формула (серії випромінювання):

$$\nu = cR \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \text{ де } R \approx 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \text{ — стала Рідберга.}$$

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 11.1.

Яку мінімальну енергію (ув еВ) необхідно передати атому водню, що перебуває в основному стані ($n = 1$), щоб перевести його у перший збуджений стан ($n = 2$)? Яка довжина хвилі λ фотона, що випромінюється при зворотному переході?

Вказівка: Різниця енергій становить $\Delta E = E_2 - E_1$.

Довжину хвилі знайдіть за формулою де Бройля: $\lambda = \frac{hc}{\Delta E}$.

Відповідь: $\Delta E = 10,2 \text{ eV}$, довжина хвилі $\lambda \approx 121,6 \text{ nm}$ (лінія Лайман- α , ультрафіолетовий діапазон).

Задача 11.2.

Визначте кратність виродження g_n енергетичного рівня атома водню з головним квантовим числом n (без урахування спіну електрона).

Вказівка: Енергія електрона залежить тільки від головного квантового числа n . При заданому n орбітальне квантове число l набуває значень від 0 до $n-1$, а магнітне квантове число m_l при кожному l набуває $2l+1$ значень.

Просумуйте кількість можливих станів: $g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$.

Відповідь: $g_n = n^2$. (З урахуванням двох можливих проекцій спіну електрона кратність виродження дорівнює $2n^2$).

Задача 11.3.

Знайдіть найбільшу λ_{max} та найменшу λ_{min} довжини хвиль фотонів у видимій серії Бальмера для випромінювання атома водню.

Вказівка: Для серії Бальмера кінцевий рівень $n_1 = 2$. Найменша енергія (найбільша довжина хвилі λ_{max}) відповідає переходу з сусіднього рівня $n_2 = 3$. Найбільша енергія (межа серії, найменша довжина хвилі λ_{min}) відповідає переходу з нескінченності $n_2 \rightarrow \infty$. Скористайтесь формулою Рідберга:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Відповідь: $\lambda_{max} = \frac{36}{5R} \approx 656,3 \text{ нм}$ (червона лінія H_α);

$$\lambda_{min} = \frac{4}{R} \approx 364,6 \text{ нм (ультрафіолетова межа серії)}.$$

ТЕМА 12. Наближені методи розрахунку. Стаціонарна теорія збурень

Базові формули:

Розклад Гамільтоніана: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, де $\hat{H}_0$ — незбурений оператор, $\hat{V}$ — мале збурення.

Поправка першого наближення (першого порядку) до енергії n -го невиродженого стану:

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dV$$

де $\psi_n^{(0)}$ — незбурені власні функції оператора $\hat{H}_0$.

Задачі для самостійного розв'язання:

Задача 12.1.

Частинка перебуває в одновимірній прямокутній ямі нескінченної глибини шириною L ($0 \leq x \leq L$). На дні ями діє мале однорідне збурення у вигляді додаткової потенціальної сходинок висотою V_0 , яка покриває ліву половину ями:

$$\hat{V} = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0, & L/2 < x \leq L \end{cases}$$

Знайдіть поправку першого порядку $E_n^{(1)}$ до енергетичних рівнів системи.

Вказівка: Незбурені функції мають вигляд

$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$. Обчисліть інтеграл збурення:

$$E_n^{(1)} = \int_0^{L/2} \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right]^2 V_0 dx.$$

Відповідь: $E_n^{(1)} = \frac{V_0}{2}$ (для всіх рівнів n). Зверніть увагу,

що результат не залежить від квантового числа n через просторову симетрію синусоїди.

Задача 12.2.

Частинка масою m у ямі нескінченної глибини шириною L збурена слабким однорідним електричним полем, яке створює додатковий потенціал $\hat{V}(x) = e\mathcal{E}\left(x - \frac{L}{2}\right)$, де $\mathcal{E}$ — напруженість поля. Знайдіть зміщення енергії основного стану $E_1^{(1)}$ у першому порядку теорії збурень.

Вказівка: Обчисліть інтеграл

$E_1^{(1)} = e\mathcal{E} \int_0^L \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \left(x - \frac{L}{2}\right) dx$. Зверніть увагу на симетрію підінтегральної функції відносно центру ями $x_0 = L/2$.

Відповідь: $E_1^{(1)} = 0$. Фізично це означає, що лінійний ефект Штарка для невироджених станів у симетричній ямі відсутній через рівномірне зміщення хмари в обидва боки від центру.

Задача 12.3.

На квантовий одновимірний гармонійний осцилятор діє мале збурення виду $\hat{V}(x) = \gamma x^3$. Доведіть, що поправка першого порядку до енергії будь-якого стану осцилятора дорівнює нулю.

Вказівка: Власні функції незбуреного осцилятора $\psi_n^{(0)}(x)$ є або суто парними, або суто непарними функціями координати x . Відповідно, квадрат модуля функції $|\psi_n^{(0)}(x)|^2$ завжди є парною функцією. Збурення $\hat{V}(x) \propto x^3$ є непарною функцією. Проаналізуйте інтеграл від добутку парної та непарної функцій у симетричних межах від $-\infty$ до $+\infty$.

Відповідь: Оскільки підінтегральна функція в інтегралі $E_n^{(1)} = \gamma \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^{(0)}(x)|^2 x^3 dx$ є непарною, інтеграл у симетричних межах тотожно дорівнює нулю. Отже, кубічне ангармонійне збурення не дає внеску в енергію рівнів у першому порядку теорії збурень.

Додатки

Системи координат

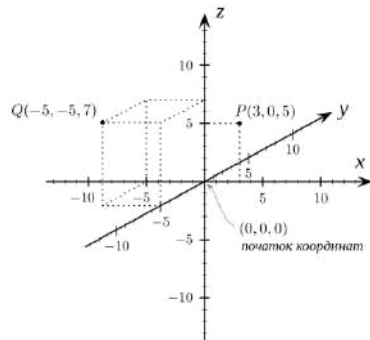
Декартові координати

В двовимірній системі Декартових координат, розташування точки P на x -площині визначається парою чисел (x, y) .

- x — відстань від точки P до осі y або значення абсциси (з урахуванням знаку)
- y — відстань від точки P до осі x або значення ординати (з урахуванням знаку)

В тривимірній системі Декартових координат, точка P в x yz -просторі локалізується вже за допомогою трьох параметрів: (x, y, z) .

- x — відстань від точки P до площини yz
- y — відстань від точки P до площини xz
- z — відстань від точки P до площини xy

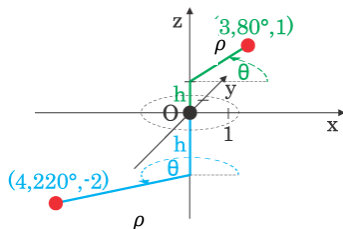


Циліндричні координати

В циліндричній системі координат, точка P репрезентується трикомпонентним кортежем (ρ, θ, φ) . В термінах Декартової системи координат,

- $\rho \geq 0$ (радіус) — відстань від осі z до точки P ,
- $0^\circ \leq \theta \leq 360^\circ$ (азимут або довгота) — кут між позитивною («плюсовою») частиною осі x та прямою лінією, уявно проведеної від полюса до точки P , зпроектованої на xy -площину

- z (висота) — відстань (з врахуванням знаку) від xy -площини до точки P .

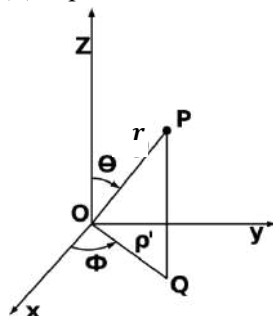


Циліндричні координати корисні для вивчення систем, симетричних навколо якоїсь осі.

Сферичні координати

В сферичній системі координат, розташування точки P визначається трьома компонентами: (r, θ, φ) . В термінах Декартової системи координат,

- $r \geq 0$ (радіус) — це відстань від точки P до полюса,
- $0^\circ \leq \varphi \leq 90^\circ$ (широта або полярний кут) — кут між z -віссю і прямою, проведеною з полюсу до точки P
- $0^\circ \leq \theta \leq 360^\circ$ (азимут або довгота) — кут між позитивною («плюсовою» x -віссю та проекцією прямої, проведеною з полюсу до точки P на xy -площину.



Зв'язок між системами координат:

Циліндрична та Декартова система:

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \varphi \\ z &= z \end{aligned}$$

Сферична, Циліндрична та Декартова системи координат:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi, \\ y = r \sin \theta \sin \varphi, \\ z = r \cos \theta. \end{cases} \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\ \theta = \arccos \left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) = \arctg \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \\ \varphi = \arctg \left(\frac{y}{x} \right). \end{cases} \begin{cases} \rho = r \sin \theta, \\ \varphi = \varphi, \\ z = r \cos \theta. \end{cases} \begin{cases} r = \sqrt{\rho^2 + z^2}, \\ \theta = \arctg \left(\frac{\rho}{z} \right), \\ \varphi = \varphi. \end{cases}$$

Тригонометричні функції та їх перетворення

	$\frac{\pi}{2} - \alpha$	$\frac{\pi}{2} + \alpha$	$\pi - \alpha$	$\pi + \alpha$	$\frac{3\pi}{2} - \alpha$	$\frac{3\pi}{2} + \alpha$	$2\pi - \alpha$	$2\pi + \alpha$
$\sin x$	$\cos \alpha$	$\cos \alpha$	$\sin \alpha$	$-\sin \alpha$	$-\cos \alpha$	$-\cos \alpha$	$-\sin \alpha$	$\sin \alpha$
$\cos x$	$\sin \alpha$	$-\sin \alpha$	$-\cos \alpha$	$-\cos \alpha$	$-\sin \alpha$	$\sin \alpha$	$\cos \alpha$	$\cos \alpha$
$\operatorname{tg} x$	$\operatorname{ctg} \alpha$	$-\operatorname{ctg} \alpha$	$-\operatorname{tg} \alpha$	$\operatorname{tg} \alpha$	$\operatorname{ctg} \alpha$	$-\operatorname{ctg} \alpha$	$-\operatorname{tg} \alpha$	$\operatorname{tg} \alpha$
$\operatorname{ctg} x$	$\operatorname{tg} \alpha$	$-\operatorname{tg} \alpha$	$-\operatorname{ctg} \alpha$	$\operatorname{ctg} \alpha$	$\operatorname{tg} \alpha$	$-\operatorname{tg} \alpha$	$-\operatorname{ctg} \alpha$	$\operatorname{ctg} \alpha$

α°	0°	30°	45°	60°	90°	120°	135°	150°	180°	210°	225°	240°	270°	300°	315°	330°	360°
α	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{4}$	$\frac{5\pi}{6}$	π	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{4}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{2}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{7\pi}{4}$	$\frac{11\pi}{6}$	2π
$\sin \alpha$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	-1	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
$\cos \alpha$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	-1	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1
$\operatorname{tg} \alpha$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	1	$\sqrt{3}$	-	$-\sqrt{3}$	-1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	1	$\sqrt{3}$	-	$-\sqrt{3}$	-1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0
$\operatorname{ctg} \alpha$	-	$\sqrt{3}$	1	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	-1	$-\sqrt{3}$	-	$\sqrt{3}$	1	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	-1	$-\sqrt{3}$	-

$$\begin{aligned}\sin \alpha + \sin \beta &= 2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2}; \\ \sin \alpha - \sin \beta &= 2 \sin \frac{\alpha - \beta}{2} \cos \frac{\alpha + \beta}{2}; \\ \cos \alpha + \cos \beta &= 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}; \\ \cos \alpha - \cos \beta &= -2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}; \\ \operatorname{tg} \alpha + \operatorname{tg} \beta &= \frac{\sin(\alpha + \beta)}{\cos \alpha \cos \beta}, \alpha, \beta \neq \frac{\pi}{2} + \pi n, n \in \mathbb{Z}; \\ \operatorname{tg} \alpha - \operatorname{tg} \beta &= \frac{\sin(\alpha - \beta)}{\cos \alpha \cos \beta}, \alpha, \beta \neq \frac{\pi}{2} + \pi n, n \in \mathbb{Z}; \\ \operatorname{ctg} \alpha + \operatorname{ctg} \beta &= \frac{\sin(\alpha + \beta)}{\sin \alpha \sin \beta}, \alpha, \beta \neq \pi n, n \in \mathbb{Z}; \\ \operatorname{ctg} \alpha - \operatorname{ctg} \beta &= \frac{-\sin(\alpha - \beta)}{\sin \alpha \sin \beta}, \alpha, \beta \neq \pi n, n \in \mathbb{Z}.\end{aligned}$$

$$|\cos \frac{\alpha}{2}| = \sqrt{\frac{1 + \cos \alpha}{2}};$$

$$|\sin \frac{\alpha}{2}| = \sqrt{\frac{1 - \cos \alpha}{2}};$$

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} = \frac{\sin \alpha}{1 + \cos \alpha} = \frac{1 - \cos \alpha}{\sin \alpha}, \alpha \neq \pi k, k \in \mathbb{Z};$$

$$\operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2} = \frac{1 + \cos \alpha}{\sin \alpha} = \frac{\sin \alpha}{1 - \cos \alpha}, \alpha \neq \pi k, k \in \mathbb{Z};$$

$$|\operatorname{tg} \frac{\alpha}{2}| = \sqrt{\frac{1 - \cos \alpha}{1 + \cos \alpha}}, \alpha \neq \pi + 2\pi k, k \in \mathbb{Z}.$$

Векторний та мішаний добуток

♦ **Обчислення векторного добутку.** Якщо вектори $\vec{a}$ і $\vec{b}$ задані своїми координатами

$$\vec{a} = x_1 \vec{i} + y_1 \vec{j} + z_1 \vec{k} \quad \text{і} \quad \vec{b} = x_2 \vec{i} + y_2 \vec{j} + z_2 \vec{k},$$

то їхній векторний добуток

$$\vec{a} \times \vec{b} = (y_1 z_2 - y_2 z_1) \vec{i} + (z_1 x_2 - z_2 x_1) \vec{j} + (x_1 y_2 - x_2 y_1) \vec{k}.$$

Цей вираз можна записати за допомогою визначників другого порядку:

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{vmatrix} y_1 & z_1 \\ y_2 & z_2 \end{vmatrix} \vec{i} - \begin{vmatrix} x_1 & z_1 \\ x_2 & z_2 \end{vmatrix} \vec{j} + \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix} \vec{k}.$$

■ Векторний добуток можна також записати за допомогою визначника третього порядку:

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix}. \quad (2)$$

♦ **Умова колінеарності векторів.** Із рівностей (1) і (2) можна отримати умову колінеарності (паралельності) двох векторів, заданих своїми координатами:

$$\frac{x_1}{x_2} = \frac{y_1}{y_2} = \frac{z_1}{z_2}.$$

♦ **Обчислення площі трикутника.** Площа трикутника, побудованого на двох векторах $\vec{a}(x_1; y_1; z_1)$ і $\vec{b}(x_2; y_2; z_2)$, що виходять з однієї точки (вершини трикутника), визначається за формулою

$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = \frac{1}{2} \sqrt{\begin{vmatrix} y_1 & z_1 \\ y_2 & z_2 \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} x_1 & z_1 \\ x_2 & z_2 \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix}^2}.$$

Мішаний добуток векторів:

Означення. Мішаний добуток векторів — це скалярний добуток вектора $\vec{a}$ на векторний добуток векторів $\vec{b}$ і $\vec{c}$.

Формула обчислення мішаного добутку векторів

Мішаний добуток векторів дорівнює визначнику матриці, отриманої з цих векторів.

Мішаний добуток векторів $\vec{a} = \{a_x, a_y, a_z\}$, $\vec{b} = \{b_x, b_y, b_z\}$ і $\vec{c} = \{c_x, c_y, c_z\}$ в декартовій системі координат можна обчислювати, скориставшись наступною формулою:

$$\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}] = \begin{vmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{vmatrix}$$

Властивості мішаного добутку векторів

- Геометричний зміст мішаного добутку.** Модуль мішаного добутку трьох векторів $\vec{a}$, $\vec{b}$ і $\vec{c}$ дорівнює об'єму паралелепіпеда, утвореного цими векторами:

$$V_{\text{парал}} = |\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}]|$$

- Геометричний зміст мішаного добутку.** Об'єм піраміди утвореної трьома векторами $\vec{a}$, $\vec{b}$ і $\vec{c}$ дорівнює одній шостій частині від модуля мішаного добутку цих векторів:

$$V_{\text{пір}} = \frac{1}{6} |\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}]|$$

- Якщо мішаний добуток трьох не нульових векторів дорівнює нулю, то ці вектори компланарні.

$$\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}] = \vec{b} \cdot (\vec{a} \times \vec{c}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

$$\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}] = \vec{b} \cdot [\vec{c} \times \vec{a}] = \vec{c} \cdot [\vec{a} \times \vec{b}] = -\vec{a} \cdot [\vec{c} \times \vec{b}] = -\vec{b} \cdot [\vec{a} \times \vec{c}] = -\vec{c} \cdot [\vec{b} \times \vec{a}]$$

- $\vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}] + \vec{b} \cdot [\vec{c} \times \vec{a}] + \vec{c} \cdot [\vec{a} \times \vec{b}] = 0$ - тотожність Якобі.

Таблиця похідних та інтегралів

- | | |
|--|--|
| 1. $(x^n)' = nx^{n-1}$ | 8. $(\arccos x)' = -\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (x < 1)$ |
| 2. $(\sqrt{x})' = \frac{1}{2\sqrt{x}}$ | 9. $(\operatorname{arctg} x)' = \frac{1}{1+x^2}$ |
| 3. $(\sin x)' = \cos x$ | 10. $(\operatorname{arcc} \operatorname{ctg} x)' = -\frac{1}{1+x^2}$ |
| 4. $(\cos x)' = -\sin x$ | 11. $(a^x)' = a^x \ln a \quad (a > 0, a \neq 1)$ |
| 5. $(\operatorname{tg} x)' = \frac{1}{\cos^2 x}$ | 12. $(e^x)' = e^x$ |
| 6. $(\operatorname{ctg} x)' = -\frac{1}{\sin^2 x}$ | 13. $(\ln x)' = \frac{1}{x} \quad (x > 0)$ |
| 7. $(\arcsin x)' = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (x < 1)$ | 14. $(\log_a x)' = \frac{1}{x \ln a} \quad (x > 0, a > 0, a \neq 1)$ |

Правила взяття похідної від складеної функції:

- | | |
|-----------------------------|--|
| 1. $(u \pm v)' = u' \pm v'$ | 4. $\left(\frac{u}{v}\right)' = \frac{u'v - uv'}{v^2}$ |
| 2. $(uv)' = u'v + uv'$ | 5. $(uvw)' = u'vw + uv'w + uvw'$ |
| 3. $(cu)' = cu'$ | 6. $(f(g(x)))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$ |

Невизначений інтеграл :

$$\int f(x) dx = F(x) + C, \quad F'(x) = f(x).$$

Таблиця основних невизначених інтегралів

- | | |
|--|--|
| 1. $\int x^\alpha dx = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} + C, \quad \alpha \neq -1.$ | 13. $\int \frac{dx}{a^2 - x^2} = \frac{1}{2a} \ln \left \frac{a+x}{a-x} \right + C, \quad a \neq 0.$ |
| 2. $\int \frac{dx}{x} = \ln x + C, \quad x \neq 0.$ | 14. $\int \frac{dx}{\sqrt{x^2 \pm a^2}} = \ln \left x + \sqrt{x^2 \pm a^2} \right + C.$ |

$$3. \int a^x dx = \frac{a^x}{\ln a} + C.$$

$$4. \int e^x dx = e^x + C.$$

$$5. \int \sin x dx = -\cos x + C.$$

$$6. \int \cos x dx = \sin x + C.$$

$$7. \int \frac{dx}{\cos^2 x} = \operatorname{tg} x + C.$$

$$8. \int \frac{dx}{\sin^2 x} = -\operatorname{ctg} x + C.$$

$$9. \int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \arcsin x + C.$$

$$10. \int \frac{dx}{\sqrt{a^2-x^2}} = \arcsin \frac{x}{a} + C.$$

$$11. \int \frac{dx}{1+x^2} = \operatorname{arctg} x + C.$$

$$12. \int \frac{dx}{a^2+x^2} = \frac{1}{a} \operatorname{arctg} \frac{x}{a} + C.$$

$$15. \int \frac{x}{\sqrt{x^2 \pm a^2}} dx = \sqrt{x^2 \pm a^2} + C.$$

$$16. \int \frac{dx}{\sin x} = \ln \left| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right| + C.$$

$$17. \int \frac{dx}{\cos x} = \ln \left| \operatorname{tg} \left(\frac{x}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right| + C.$$

$$18. \int \operatorname{tg} x dx = -\ln |\cos x| + C.$$

$$19. \int \operatorname{ctg} x dx = \ln |\sin x| + C.$$

$$20. \int \operatorname{sh} x dx = \operatorname{ch} x + C.$$

$$21. \int \operatorname{ch} x dx = \operatorname{sh} x + C.$$

$$22. \int \frac{dx}{\operatorname{ch}^2 x} = \operatorname{th} x + C.$$

$$23. \int \frac{dx}{\operatorname{sh}^2 x} = -\operatorname{cth} x + C.$$

$$\int x \cos ax dx = \frac{x}{a} \sin ax + \frac{1}{a^2} \cos ax + C$$

$$\int x^2 \cos ax dx = \frac{x^2}{a} \sin ax + \frac{2x}{a^2} \cos ax - \frac{2}{a^3} \sin ax + C$$

$$\int x \sin ax dx = -\frac{x}{a} \cos ax + \frac{1}{a^2} \sin ax + C$$

$$\int x^2 \sin ax dx = -\frac{x^2}{a} \cos ax + \frac{2x}{a^2} \sin ax + \frac{2}{a^3} \cos ax + C$$

Рекомендована література

Основна

1. І.О. Вакарчук Квантова Механіка: – Львів 2014 -782 с.
2. М.В. Ткач Квазічастинки у наносистемах. квантові точки та дроти. Чернівці, Рута: 2018 р. 331 с.
3. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки: Навч. посіб. – К.: Вища шк., 2003. – 230 с.
4. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Основи квантової механіки. – К.: Вища шк., 2002. – 230 с.
5. Висоцький В.І. Квантова механіка та її використання в прикладній фізиці/ В.І. Висоцький. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2008. – 367с.
6. Ткачук В.М. Фундаментальні проблеми квантової механіки/ В.М. Ткачук. – Л.: ЛНУ ім. Івана Франка, 2011. – 144 с.
7. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки/ І.Р. Юхновський. – К.: Либідь, 2002. – 392с.

Додаткова

1. Давидов, О.С. Квантова механіка, К.: Академперіодика, 2012, 706 с.
2. Кобушкін О.П. Квантова механіка. Навчальний посібник // Київ: НТУУ «КПІ», 2016. – 263 с.

3. Глауберман А. Ю. Квантова механіка. Львів, 1962.
4. Юхновський І. Р. Квантова механіка. Київ, 1995.
5. Вакарчук І. О., Кулій Т. В., Кнігініцький О. В., Ткачук В. М. Збірник задач з квантової механіки. Львів, 1996.
6. Понеділок Г. В. Основи квантової фізики. Львів, 2009.

Інтернет ресурси:

1. Бібліотека Житомирського державного університету імені Івана Франка [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: http://irbis.zu.edu.ua/cgi-bin/irbis64r_11/cgiirbis_64.exe
2. Бібліотека українських підручників [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <http://pidruchniki.ws/>.
3. Державна науково-педагогічна бібліотека України ім. В. О. Сухомлинського. [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: [6. www.dnpb.gov.ua](http://www.dnpb.gov.ua).
4. Національна бібліотека України імені В. І. Вернадського: режим доступу: <http://nbuv.gov.ua>
5. Цифрова фізична лабораторія: режим доступу: <https://phet.colorado.edu/en/simulations/>

ЗМІСТ

МОДУЛЬ 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ.....	7
Практичне заняття №1. Опис стану в квантовій механіці. Хвильова функція вільної частинки та її статистичний зміст. Умова нормування.	7
Практичне заняття №2. Середні значення фізичних величин та оператори в квантовій механіці. Комутатори операторів координат та імпульсу.....	15
1.3. Практичне заняття №3. Рівняння на власні функції та власні значення. Властивості дискретного та неперервного.....	23
Практичне заняття №4. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Оцінка енергії основних станів мікросистем.	32
Практичне заняття №5. Часова та стаціонарна форми рівняння Шредінгера. Рівняння безперервності та густина току ймовірності. .	40
Практичне заняття №6. Зміна середніх значень фізичних величин з часом. Рівняння руху для операторів (динаміка квантових станів)....	48
МОДУЛЬ 2. НАЙПРОСТІШІ ЗАДАЧІ З КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ	56
ТЕМА 7. Рух частинки в одновимірній прямокутній потенціальній ямі нескінченної глибини	56
ТЕМА 8. Рух частинки в одновимірній симетричній потенціальній ямі скінченної глибини	58
ТЕМА 9. Рух квантової частинки в полі потенціального бар'єру. Ефект тунелювання	60
ТЕМА 10. Лінійний гармонійний осцилятор в квантовій механіці	63
ТЕМА 11. Рух частинки в центральносиметричному полі. Атом водню	65
ТЕМА 12. Наближені методи розрахунку. Стаціонарна теорія збурень	67
Додатки.....	71
Системи координат.....	71
Тригонометричні функції та їх перетворення.....	73

Векторний та мішаний добутки.....	74
Таблиця похідних та інтегралів.....	76
Рекомендована література	78
ЗМІСТ	80

Навчально-методичний посібник

**Збірник практичних завдань з курсу
«Квантова Механіка»
для спеціальності
«А4 Середня освіта (Фізика та астрономія)»**

*Навчально-методичний посібник
для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
спеціальності
«А4 Середня освіта (Фізика та астрономія)»*

**Автори: Гришук Андрій Миколайович,
Бендес Юрій Петрович**
Відповідальний за випуск
Літературний редактор