Приклади розв’язку задач

Задача 1. Довести самоспряженість оператору $\hat{p}_x$.

Розв’язок. За визначенням, у одномірному випадку оператор $\hat{A}$ називається самоспряженим, якщо виконується умова $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \hat{A}^* \psi_1^* \, dx$, де ψ_1 та ψ_2 - довільні функції. Спробуємо довести такі співвідношення, використовуючи явний вигляд операторів, що розглядаються. А саме, враховуючи, що $\hat{p}_x = -i\hbar \, \partial/\partial x$, маємо:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(-i\hbar \, \partial/\partial x\right) \psi_2 \, dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(\partial \psi_2/\partial x\right) dx .$$

Беручи до уваги що $\left(\partial\psi/\partial x\right) dx = d\psi$ та застосувавши формулу інтегрування по частинах отримаємо

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(\partial \psi_2/\partial x\right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \, d\psi_2 =$$

$$= -i\hbar \left(\psi_1^* \psi_2\right)\Big|_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(\partial \psi_1^*/\partial x\right) dx .$$

Так як на нескінченності хвильові функції прямують до нуля, то нульовим буде і перший доданок останньої суми. Якщо, згадати, що $\hat{p}_x^* = i\hbar \, \partial/\partial x$, то остаточно матимемо

$$i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(\partial \psi_1^*/\partial x\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(i\hbar \partial/\partial x\right) \psi_1^* \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \hat{p}_x^* \psi_1^* \, dx .$$

Таким чином,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \hat{p}_x^* \psi_1^* \, dx ,$$

Що і треба було довести.

Задача 2. Знайти наступні комутатори: а) $[\hat{L}_x , y]$; б) $[\hat{L}_y , \hat{p}_x]$.

Розв'язок. Побудуємо спочатку явний вигляд операторів компонент моменту імпульсу $\hat{L}_x$ та $\hat{L}_y$. У класичній фізиці вектор моменту імпульсу $\vec{L}$ задається співвідношенням $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$, тобто компоненти вектора моменту імпульсу пов'язані з компонентами радіус-вектора та вектора імпульсу наступним чином:

$$L_x = y\, p_z - z\, p_y\ ; \qquad L_y = z\, p_x - x\, p_z\,.$$

Відповідно,

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

а) Таким чином

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

Скористаємось комутативними співвідношеннями між операторами компонент радіус-вектора та вектора імпульсу, а саме

$$\begin{matrix} [\hat{p}_z , y] = 0 \\ [\hat{p}_y , y] = -i\hbar \end{matrix} \qquad \text{тобто} \qquad \begin{matrix} \hat{p}_z\, y = y\, \hat{p}_z \\ \hat{p}_y\, y = y\, \hat{p}_y - i\hbar \end{matrix}\ ,$$

тобто перший та другий доданок суми можна замінити наступним чином:

$$y\, \hat{p}_z\, y - z\, \hat{p}_y\, y - y\, y\, \hat{p}_z + y\, z\, \hat{p}_y = y\, y\, \hat{p}_z - z(y\, \hat{p}_y - i\hbar) - y\, y\, \hat{p}_z + y\, z\, \hat{p}_y =$$
$$= y\, y\, \hat{p}_z - z\, y\, \hat{p}_y + z\, i\hbar - y\, y\, \hat{p}_z + y\, z\, \hat{p}_y\,.$$

Враховуючи, що $z\, y = y\, z$, остаточно отримуємо

$$[\hat{L}_x , y] = i\hbar\, z\,.$$

б)

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

$$= z\hat{p}_x \hat{p}_x - x\hat{p}_z \hat{p}_x - \hat{p}_x z \hat{p}_x + \hat{p}_x x \hat{p}_z .$$

Так як

$$\begin{aligned} &[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0 & & \hat{p}_z \hat{p}_x = \hat{p}_x \hat{p}_z \\ &[\hat{p}_x, \mathrm{z}] = 0 \quad , & \text{тобто} \quad & \hat{p}_x z = z\hat{p}_x \quad , \\ &[\hat{p}_x, x] = -i\hbar & & \hat{p}_x x = x\hat{p}_x - i\hbar \end{aligned}$$

Тоді, підставляючи ці рівності у другий, третій та четвертий доданки відповідно, отримуємо

$$z\hat{p}_x \hat{p}_x - x\hat{p}_z \hat{p}_x - \hat{p}_x z\hat{p}_x + \hat{p}_x x\hat{p}_z = z\hat{p}_x \hat{p}_x - x\hat{p}_x \hat{p}_z - z\hat{p}_x \hat{p}_x +$$

$$+ \left(x\hat{p}_x - i\hbar \right) \hat{p}_z = -x\hat{p}_x \hat{p}_z + x\hat{p}_x \hat{p}_z - i\hbar \hat{p}_z = -i\hbar \hat{p}_z ,$$

тобто

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

Задача 3. Знайти власне значення оператора $\hat{A} = -\dfrac{d^2}{dx^2}$, що належить власній функції $\psi_A = \sin 2x$.

Розв'язок. Нагадаємо, що у випадку, коли ψ_A та λ є, відповідно, власною функцією та власним значенням оператора $\hat{A}$, то має виконуватися рівність

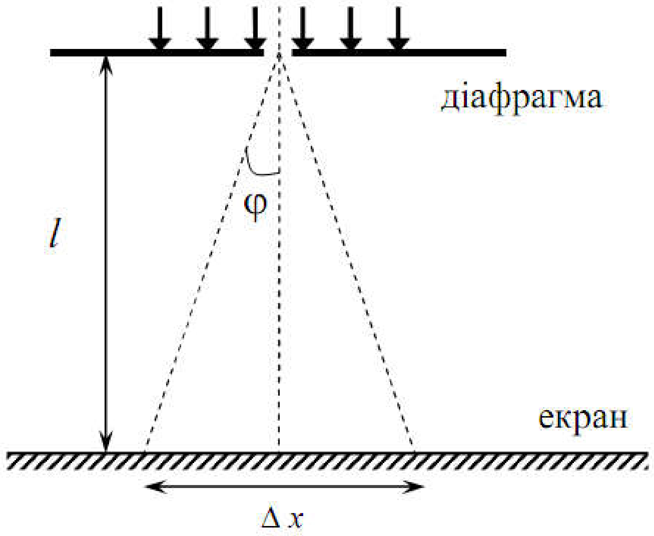
$$\hat{A}\psi_A = \lambda \psi_A . \qquad (1)$$

Подіємо оператором $\hat{A}$ на функцію ψ_A:

$$\hat{A}\psi_A = -\frac{d^2}{dx^2} \sin 2x = -\frac{d}{dx}(2\cos 2x) = -2(-2\sin 2x) = 4\sin 2x . \qquad (2)$$

Порівнюючи формули (1) та (2) можемо зробити висновок, що шукане власне значення $\lambda = 4$.

Задача 4. Потік моноенергетичних електронів падає нормально на діафрагму з вузькою щілиною шириною $b = 2{,}0$ мкм. Знайти швидкість електронів, якщо на екрані, який знаходиться від щілини на відстані $l = 50$ см, ширина центрального дифракційного максимуму $\Delta x = 0{,}36$ мм.



Розв'язок. З курсу оптики відомо, що границі центрального дифракційного максимуму при дифракції Фраунгофера на одній щілині спостерігаються під кутом φ, для якого

$$\sin\varphi = \lambda/b, \qquad (1)$$

де кут φ відраховується від нормалі до діафрагми, а λ - довжина хвилі падаючого опромінення. Так як в даному випадку $l >> \Delta x$, то можна записати

$$\sin\varphi \approx \mathrm{tg}\,\varphi = \frac{\Delta x}{2l}. \qquad (2)$$

Для потоку електронів використовуючи співвідношення де Бройля можна записати

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \qquad (3)$$

де p – імпульс електрону. У випадку, коли швидкість частинок набагато менша за швидкість світла

$$p = mV, \qquad (4)$$

де m – маса електрону, V – його швидкість. Підставляючи вирази (2)-(4) у формулу (1) отримуємо

$$\frac{\Delta x}{2l} = \frac{2\pi\hbar}{bmV}, \qquad (5)$$

звідки остаточно виражаємо

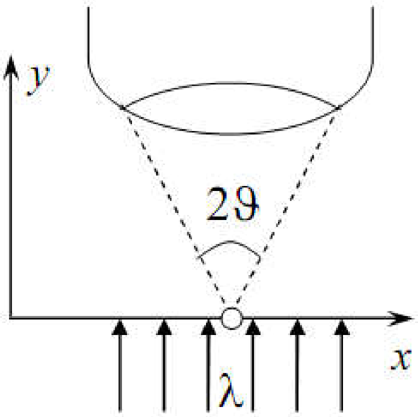
$$V = \frac{4\pi\hbar l}{b\, m \Delta x}. \qquad (6)$$

Враховуючи, що $\hbar = 1{,}06 \cdot 10^{-34}$ Дж с, $l = 0{,}5$ м, $b = 2 \cdot 10^{-6}$ м, $m = 9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг, $\Delta x = 3{,}6 \cdot 10^{-4}$ м, то обчислення, проведені згідно з формулою (6), дозволяють записати

$$V \approx 1 \cdot 10^{6}\ \text{м/с}.$$

Отримане значення свідчить на користь можливості використання виразу (4).

Задача 5. Переконайтесь, що вимірювання координати x частинки за допомогою мікроскопу (див. рисунок) призводить до такої невизначеності її імпульсу Δp_x, що $\Delta x\, \Delta p_x \geq \hbar$. Зважте, що роздільна здатність мікроскопу $d = \lambda / \sin\vartheta$, де λ - довжина хвилі світла, яке використовується.



Розв'язок. Для частинки невизначеність її координати, яка вимірюється за допомогою мікроскопу, визначається роздільною здатністю приладу, тобто

$$\Delta x = d = \frac{\lambda}{\sin\vartheta}. \qquad (1)$$

Водночас, якщо для освітлення використовується світло з довжиною хвилі λ, то імпульс налітаючих фотонів має лише компоненту, спрямовану паралельно осі y, величина якої

$$p_{y,ph} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \qquad (2)$$

де $\hbar\omega$ - енергія фотону. Для того, щоб після розсіяння на частинці фотон потрапив у об'єктив мікроскопа, необхідно щоб напрям його імпульсу знаходився у конусі з кутом при вершині 2ϑ. Якщо припустити, що після розсіяння компонента імпульсу $p_{y,ph}$ не змінюється, то це означає, що

$$\frac{p_{x,ph}}{p_{y,ph}} < \operatorname{tg}\vartheta,$$

або

$$p_{x,ph} < \left(\frac{2\pi\hbar\operatorname{tg}\vartheta}{\lambda}\right). \qquad (3)$$

Водночас, компонента $p_{x,ph}$ з'явилася у фотона в результаті взаємодії з частинкою, що означає зміну компоненти імпульсу частинки на таку ж величину. Так як невідомий точний напрямок поширення фотону, то можемо стверджувати, що невизначеність імпульсу частинки

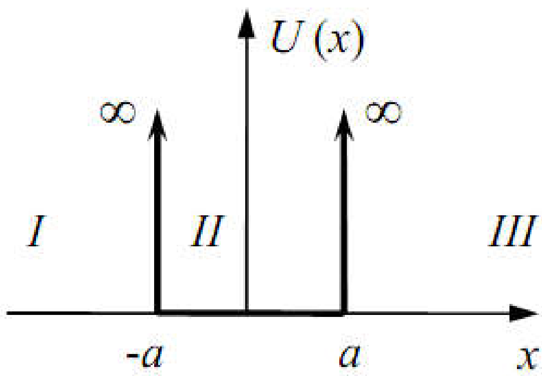
$$\Delta p_x \approx \left(\frac{2\pi\hbar\operatorname{tg}\vartheta}{\lambda}\right) \approx \left(\frac{2\pi\hbar\sin\vartheta}{\lambda}\right). \qquad (4)$$

У виразі (4) враховано, що кут ϑ малий і тому $\operatorname{tg}\vartheta \approx \sin\vartheta$. Об'єднуючи вирази (1) та (4) отримуємо:

$$\Delta x\,\Delta p_x \approx \frac{\lambda}{\sin\vartheta}\,\frac{2\pi\hbar\sin\vartheta}{\lambda} = 2\pi\hbar > \hbar.$$

Задача 6. Знайти власні значення енергії та хвильову функцію частинки масою m, потенціальна енергія якої описується виразом

$$U(x) = \begin{cases} \infty, \ x \le -a; \\ 0, \ -a < x < a; \\ \infty, \ x \ge a. \end{cases}$$



(задача про частинку, яка знаходиться в нескінченно глибокій одномірній прямокутній потенціальній ямі шириною $2a$).

Розв'язок. Для знаходження хвильової функції ψ та власного значення енергії E частинки масою m, яка знаходиться у потенціальному полі $U(x)$, необхідно розв'язати рівняння Шрьодінгера, яке у стаціонарному одномірному випадку має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}\,x^2}+U(x)\,\psi=E\,\psi. \qquad (1)$$

Вигляд залежності потенціальної енергії від координати наведено на рисунку. Розіб'ємо весь простір на три області залежно від величини потенціальної енергії: область *I*, де $x\le -a$, $U\to\infty$; область *II*, де $-a<x<a$, $U=0$ та область *III*, де $x\ge a$, $U\to\infty$; та запишемо рівняння Шрьодінгера для кожної області окремо:

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_I}{\mathrm{d}\,x^2}+(E-U)\,\psi_I=0;\\
&\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2}+E\,\psi_{II}=0;\\
&\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{III}}{\mathrm{d}\,x^2}+(E-U)\,\psi_{III}=0.
\end{aligned} \qquad (2)$$

Так як хвильова функція та її перша та друга похідні мають бути обмеженими, а також обмеженим є значення повної енергії частинки, то єдиноможливим розв'язком рівняння Шрьодінгера за межами інтервалу $-a<x<a$ (в *I* та *III* областях) є нульове значення хвильової функції у цих точках простору, тобто

$$\psi_I=0; \quad \psi_{III}=0. \qquad (3)$$

Якщо поглянути на цю ситуацію з іншої точки зору, то відповідно до класичних уявлень, частинка з кінцевим значенням повної енергією не може перебувати в області простору, де її потенційна енергія прямує до нескінченності. У квантовій механіці це твердження замінюється вимогою перетворення у нуль густини ймовірності $\rho=|\,\psi(x)\,|^2=\psi(x)\;\psi^*(x)$ (а отже і самої функції $\psi(x)$) в тих точках, де $U(x)\to\infty$.

Рівняння Шрьодінгера для хвильової функції у області *II* перепишемо у вигляді

$$\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2}+k^2\,\psi_{II}=0, \qquad (4)$$

де для скорочення введено позначення $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Рівняння (4) не лінійне однорідне диференційне рівняння, його загальний розв'язок має вигляд

$$\psi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx). \tag{5}$$

де A та B – константи. Так як хвильова функція має бути неперервною, то необхідно, щоб в точках $x = \pm a$ значення функцій з сусідніх областей були однакові, тобто

$$\begin{cases} \psi_{II}(x=-a) = \psi_I(x=-a); \\ \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a). \end{cases} \tag{6}$$

Використовуючи отримані розв'язки (3) та (5), система рівнянь (6) може бути переписана у вигляді

$$\begin{cases} A\cos(k\,a) - B\sin(k\,a) = 0; \\ A\cos(k\,a) + B\sin(k\,a) = 0. \end{cases} \tag{7}$$

Очевидно, що система (7) має розв'язок лише в тому випадку, коли хоча б один з коефіцієнтів (A або B) дорівнює нулеві. Звичайно, з математичної точки зору цілком прийнятним є і варіант коли одночасно і $A = 0$, і $B = 0$. Але в цьому випадку, як видно з рівнянь (3) та (5), $\psi = 0$ при будь-яких значеннях x, тобто ймовірність знайти частинку є нульовою у всіх точках простору, а це є неприйнятним з фізичної точки зору. Таким чином, розв'язки розбиваються на два класи.

1. $B = 0$, $A \neq 0$, $\psi_{II}(x) = A\cos(kx)$, причому в цьому випадку

$$\cos(k\,a) = 0,$$

а отже

$$k = \frac{\pi}{2a}\,n, \text{ де } n = 1, 3, 5\ldots \text{ (непарне ціле число).}$$

2. $A = 0$, $B \neq 0$, $\psi_{II}(x) = B\sin(kx)$, причому в цьому випадку

$$\sin(k\,a) = 0,$$

а отже

$$k = \frac{\pi}{2a}\, n\text{, де } n = 2, 4, 6\ldots \text{ (парне ціле число).}$$

В останньому випадку до ряду парних чисел не включено 0, бо тоді $\psi_{II} \equiv 0$, а такий розв’язок, як зазначалося вище, не має фізичного змісту.

Узагальнюючи отримані на даний момент результати, запишемо

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x \le -a; \\ A\cos\left(\dfrac{\pi n}{2a}x\right),\ n = 1,3,5\ldots & \\ & -a < x < a; \\ B\sin\left(\dfrac{\pi n}{2a}x\right),\ n = 2,4,6\ldots & \\ 0, & x \ge a. \end{cases} \tag{8}$$

Крім того,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{\pi}{2a}\, n\right)^2, \quad n = 1,2,3,4,5\ldots,$$

що дає змогу визначити можливі значення енергії

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1,2,3,4,5\ldots \tag{9}$$

Тобто енергетичний спектр частинки у даному випадку дискретний, величина повної енергії частинки залежить від квантового числа *n*. Для знаходження коефіцієнтів *A* та *B* скористаємось умовою нормування хвильової функції, яка у одномірному випадку має вигляд

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1. \tag{10}$$

Розглянемо для визначеності випадок, коли $n = 1$. Тоді

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{-a} |\psi_I|^2 dx + \int_{-a}^{a} |\psi_{II}|^2 dx + \int_{a}^{\infty} |\psi_{III}|^2 dx = \int_{-a}^{a} |\psi_{II}|^2 dx =$$

$$= \int_{-a}^{a} A^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{2a}x\right) dx = \int_{-a}^{a} A^2 \left[\frac{\cos(\pi x/a) + 1}{2}\right] dx = A^2 a = 1.$$

Тобто, $A = 1/\sqrt{a}$. Цілком аналогічно можна отримати, що $B = 1/\sqrt{a}$. Таким чином, остаточний вигляд шуканої хвильової функції наступний

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x \le -a; \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\dfrac{\pi n}{2a} x\right), \ n = 1,3,5\ldots & \\ & -a < x < a; \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\dfrac{\pi n}{2a} x\right), \ n = 2,4,6\ldots & \\ 0, & x \ge a. \end{cases} \tag{11}$$

Для прикладу розглянемо декілька хвильових функцій, які описують можливі стани частинки у заданому потенціальному полі і відповідають початковим значенням квантового числа *n*.

$n = 1$. Користуючись виразами (11) та (9) можемо сказати, що даний стан частинки описується хвильовою функцією

$$\psi_1(x) = \begin{cases} 0, & |x| \ge a; \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\dfrac{\pi x}{2a}\right), & |x| < a, \end{cases}$$

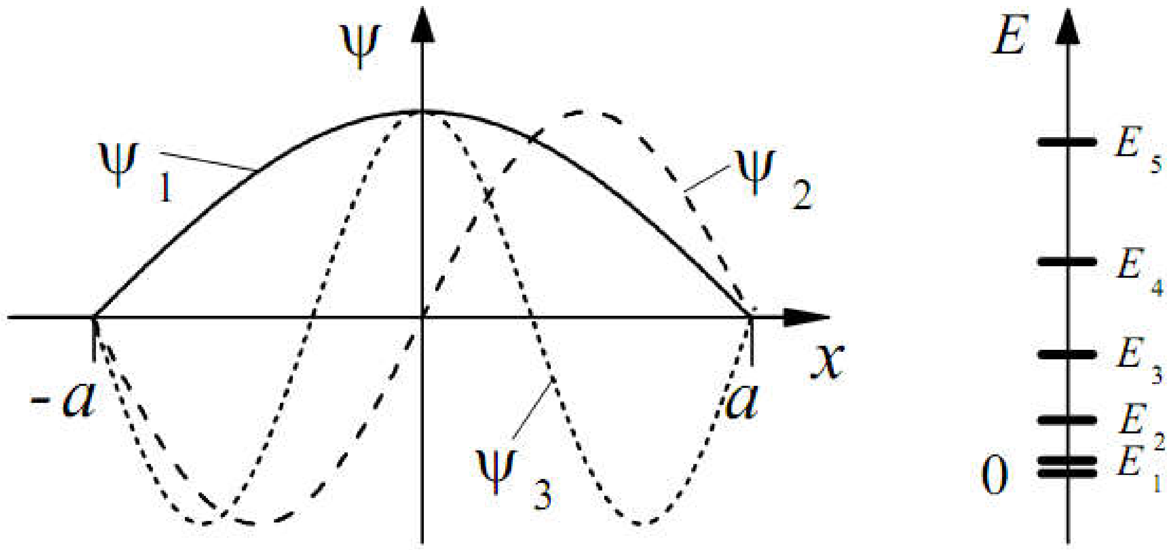
а енергія частинки при цьому дорівнює $E_1 = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$. Це найменше можливе значення енергії, тобто стан при $n = 1$ є основним.

$n = 2$. В цьому випадку енергія частинки $E_2 = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$, а хвильова функція

$$\psi_2(x) = \begin{cases} 0, & |x| \ge a; \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\dfrac{\pi x}{a}\right), & |x| < a. \end{cases}$$

$n = 3$. Для цього стану $E_3 = \dfrac{9\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$, $\psi_3(x) = \begin{cases} 0, & |x| \ge a; \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\dfrac{3\pi x}{2a}\right), & |x| < a. \end{cases}$

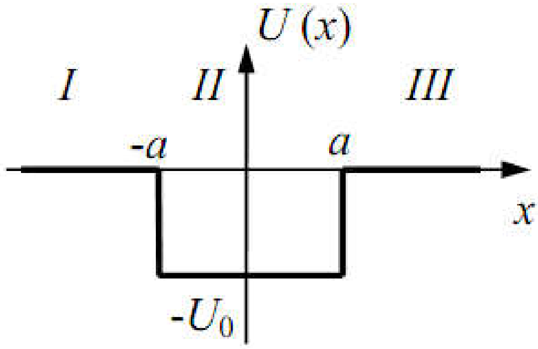
Вигляд декількох хвильових функцій та частини енергетичного спектру частинки у нескінченно глибокій потенціальній ямі наведено на рисунках.



Задача 7. Знайти власні значення енергії E та хвильову функцію ψ частинки масою m, потенціальна енергія якої описується виразом

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq a \\ -U_0, & |x| < a \end{cases}$$

(задача про частинку в потенціальній ямі скінченної глибини). Розглянути випадок, коли $-U_0 < E < 0$.



Розв'язок. Як і в попередній задачі, розіб'ємо весь простір на три області залежно від величини потенціальної енергії: область *I*, де $x \leq -a$, $U = 0$; область *II*, де $-a < x < a$, $U = -U_0$ та область *III*, де $x \geq a$, $U = 0$; і запишемо рівняння Шрьодінгера для кожної області окремо:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_I}{\mathrm{d}x^2} + E\psi_I = 0;$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_{II}}{\mathrm{d}x^2} + (U_0 + E)\psi_{II} = 0; \qquad (1)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_{III}}{\mathrm{d}x^2} + E\psi_{III} = 0.$$

Якщо врахувати умову $-U_0 < E < 0$, то систему (1) можна переписати наступним чином:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_I}{\mathrm{d}\,x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\,|\,E\,|\,\psi_I = 0;\\
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(U_0 - |\,E\,|\big)\,\psi_{II} = 0;\\
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{III}}{\mathrm{d}\,x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\,|\,E\,|\,\psi_{III} = 0.
\end{aligned} \tag{2}$$

Ввівши позначення

$$\beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\,|\,E\,|}\,, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\big(U_0 - |\,E\,|\big)} \tag{3}$$

остаточно сукупність рівнянь Шрьодінгера можна записати у вигляді

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_I}{\mathrm{d}\,x^2} - \beta^2\,\psi_I = 0;\\
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2} + k^2\,\psi_{II} = 0;\\
&\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{III}}{\mathrm{d}\,x^2} - \beta^2\,\psi_{III} = 0.
\end{aligned} \tag{2a}$$

Зауважимо, що коефіцієнти β та k є дійсними. Розв'язки диференційних рівнянь (2а) мають вигляд:

$$\begin{aligned}
&\psi_I = A_1 \exp(-\beta x) + B_1 \exp(\beta x);\\
&\psi_{II} = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx);\\
&\psi_{III} = A_3 \exp(-\beta x) + B_3 \exp(\beta x),
\end{aligned} \tag{4}$$

де A_i та B_i ($i = \overline{1,3}$) – константи, які спробуємо надалі визначити.

Оскільки хвильова функція має бути обмеженою при будь-яких значеннях аргументу, то щоб не допустити необмеженого зростання функції ψ_I при $x \to -\infty$ та функції ψ_{III} при $x \to \infty$ необхідно покласти $A_1 = 0$ та $B_3 = 0$ відповідно.

Зазначимо, що так як залежність $U(x)$ є симетричною функцією відносно початку координат, то цілком очікуваним є те, що і густина ймовірності знаходження частинки в різних точках простору також має мати таку саму симетрію. Це, в свою чергу, означає, що повинна виконуватись рівність $|\psi_I(-x)|^2 = |\psi_{III}(x)|^2$, тобто мають бути рівними квадрати модулів хвильових функцій в областях *I* та *III* для точок, однаково віддалених від початку координат. А це можливо лише у випадку, коли

$$B_1^2 = A_3^2. \tag{5}$$

Тобто, якщо припустити, що B_1 та A_3 дійсні, то вони мають бути пов'язані між собою наступним чином:

$$B_1 = A_3 \quad \text{або} \quad B_1 = -A_3. \tag{5а}$$

Хвильова функція, як і її перша похідна має бути неперервною, то необхідно, щоб виконувались умови

$$\begin{aligned} &\psi_{II}(x=-a) = \psi_I(x=-a); \\ &\left(\frac{\mathrm{d}\psi_{II}}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{x=-a} = \left(\frac{\mathrm{d}\psi_I}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{x=-a}; \\ &\psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a); \\ &\left(\frac{\mathrm{d}\psi_{II}}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{x=a} = \left(\frac{\mathrm{d}\psi_{III}}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{x=a}. \end{aligned} \tag{6}$$

або, використовуючи (4), їх можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned} A_2\cos(ka) - B_2\sin(ka) &= B_1\exp(-\beta a); \\ k\,A_2\sin(ka) + k\,B_2\cos(ka) &= \beta B_1\exp(-\beta a); \\ A_2\cos(ka) + B_2\sin(ka) &= A_3\exp(-\beta a); \\ -k\,A_2\sin(ka) + k\,B_2\cos(ka) &= -\beta A_3\exp(-\beta a). \end{aligned} \tag{6а}$$

Більш зручно провести аналіз системи рівнянь (6а), якщо провести її певне перетворення. Для цього додамо перше та третє рівняння і віднімемо від другого четверте; крім того віднімемо від третього рівняння перше та додамо між собою друге та четверте. В результаті отримаємо наступну систему

$$
\begin{gathered}
2A_2\cos(ka) = (B_1 + A_3)\exp(-\beta a)\ ; \\
2k\,A_2\sin(ka) = \beta(B_1 + A_3)\exp(-\beta a); \\
2B_2\sin(ka) = (A_3 - B_1)\exp(-\beta a); \\
2k\,B_2\cos(ka) = -\beta(A_3 - B_1)\exp(-\beta a).
\end{gathered}
\tag{6б}
$$

Врахуємо, що всі чотири коефіцієнти (A_2, A_3, B_1 та B_2) одночасно не можуть бути рівними нулеві (бо в цьому випадку нульовою є ймовірність знайти частинку у будь-якій точці простору), а також що одночасно з системою (6б) має виконуватись і умова (5а). У зв'язку з цим розв'язки розпадаються на два класи.

1. Якщо $B_1 = A_3$, то з двох останніх рівнянь системи (6б) випливає, що $B_2 = 0$, а з двох перших – що $A_2 \neq 0$ і що має виконуватись умова

$$
k\ \mathrm{tg}(k\,a) = \beta. \tag{7}
$$

Останнє співвідношення можна отримати, якщо поділити друге рівняння системи (6б) на перше.

2. Якщо $B_1 = -A_3$, то з двох перших рівнянь системи (6б) випливає, що $A_2 = 0$, а з двох останніх – що $B_2 \neq 0$ і що має виконуватись умова

$$
k\ \mathrm{ctg}(k\,a) = -\beta. \tag{8}
$$

Зазначимо, що умови (7) та (8) одночасно не можуть виконуватись, так як в цьому випадку мала б мати місце також і рівність $k^2 = -\beta^2$, що неможливо через те що і k, і β дійсні. Врахувавши явний вигляд цих коефіцієнтів (3), можемо остаточно зробити висновки, що стани, в яких може знаходитися частинка розділяються на два наступні класи.

Можливі значення енергії в першому класі є коренями рівняння

$$
\sqrt{(U_0 - |E|)}\ \mathrm{tg}\left(\sqrt{2m(U_0 - |E|)}\ \frac{a}{\hbar}\right) = \sqrt{|E|}, \tag{7а}
$$

кожному значенню енергії відповідає парна хвильова функція

$$\psi(x)=\begin{cases} B_1\exp\left(\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}\;x\right), & x\le -a;\\ A_2\cos\left(\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-|E|\right)}\,x\right), & -a<x<a;\\ B_1\exp\left(-\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}\;x\right), & x\ge a. \end{cases} \tag{9}$$

Можливі значення енергії другого класу розв'язків є коренями рівняння

$$\sqrt{\left(U_0-|E|\right)}\,\mathrm{ctg}\left(\sqrt{2m\left(U_0-|E|\right)}\;\frac{a}{\hbar}\right)=-\sqrt{|E|}, \tag{8a}$$

кожному значенню енергії відповідає непарна хвильова функція

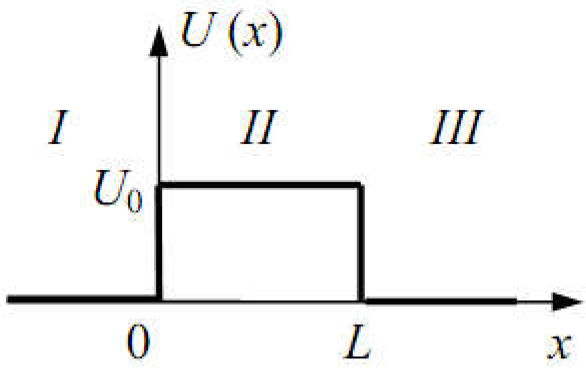
$$\psi(x)=\begin{cases} B_1\exp\left(\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}\;x\right), & x\le -a;\\ B_2\sin\left(\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-|E|\right)}\,x\right), & -a<x<a;\\ -B_1\exp\left(-\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}\;x\right), & x\ge a. \end{cases} \tag{10}$$

Зв'язок між константами B_1 та A_2 (B_2) можна знайти, використавши умову нормування хвильової функції:

$$A_2^2=B_2^2=\frac{1}{a}\left[1-\frac{k^2+\beta^2}{k^2\beta}B_1^2\exp(-2\beta a)\right]. \tag{11}$$

Задача 8. Залежність потенціальної енергії частинки масою m від координати описується виразом $U(x)=\begin{cases}0, & x\le 0, x\ge L\\ U_0, & 0<x<L\end{cases}$. Частинка рухається з області від'ємних значень координати в бік її зростання з енергією $E<U_0$. Знайти коефіцієнт прозорості даного потенціального бар'єру D.

Розв'язок. Вигляд залежності потенціальної енергії від координати наведено на рисунку. Розіб'ємо весь простір на три області, які відрізняються величиною потенціальної енергії: область *I*, де $x \le 0$, $U = 0$; область *II*, де $0 < x < L$, $U = U_0$ та область *III*, де $x \ge L$, $U = 0$; і запишемо рівняння Шрьодінгера для кожної області окремо:



$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_I}{\mathrm{d}\,x^2} + E\,\psi_I = 0;$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2} - \left(U_0 - E\right)\psi_{II} = 0; \tag{1}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{III}}{\mathrm{d}\,x^2} + E\,\psi_{III} = 0.$$

Введемо позначення

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E\,, \quad \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0 - E\right). \tag{2}$$

Зазначимо, що так як $E > 0$, то і *k*, і γ є дійсними. Тепер систему рівнянь (1) можна записати у вигляді

$$\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_I}{\mathrm{d}\,x^2} + k^2\,\psi_I = 0;$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{II}}{\mathrm{d}\,x^2} - \gamma^2\,\psi_{II} = 0; \tag{1a}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\,\psi_{III}}{\mathrm{d}\,x^2} + k^2\,\psi_{III} = 0.$$

Її розв'язок має вигляд:

$$\psi_I = A_1\exp\left(-i\,k\,x\right) + B_1\exp\left(i\,k\,x\right);$$

$$\psi_{II} = A_2\exp\left(-\gamma\,x\right) + B_2\exp\left(\gamma\,x\right); \tag{3}$$

$$\psi_{III} = A_3\exp\left(-i\,k\,x\right) + B_3\exp\left(i\,k\,x\right),$$

де A_i та B_i $(i = \overline{1, 3})$ – нормувальні коефіцієнти. Фактично, перший доданок у формулах для ψ_I та ψ_{III} описує плоску хвилю, яка поширюється у бік зменшення координати *x*, а другий – хвилю, що поширюється у протилежному напрямі. Так як за умовою задачі частинка рухається і бік зростання координати, то можемо покласти $A_1 = 0$, $A_3 = 0$. Згідно з класичними уявленнями частинка не може перебувати у області, де її повна енергія менша потенційної (область $0 < x < L$ в нашому випадку). Щоб це врахувати забезпечимо зменшення хвильової функції ψ_{II} (а отже, і густини імовірності знаходження частинки) при віддалені від точки з координатою $x = 0$ - точки з максимальним значенням абсциси, куди може потрапити частинка відповідно до класичних уявлень. Для цього покладемо $B_2 = 0$.* З врахуванням цього систему (3) можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned} \psi_I &= B_1 \exp(i k x); \\ \psi_{II} &= A_2 \exp(-\gamma x) \\ \psi_{III} &= B_3 \exp(i k x). \end{aligned} \tag{3a}$$

Для забезпечення неперервності хвильової функції необхідно, щоб

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x = 0) &= \psi_I(x = 0); \\ \psi_{II}(x = L) &= \psi_{III}(x = L). \end{aligned} \tag{4}$$

Підставивши в (4) вирази (3а) отримуємо

$$\begin{aligned} A_2 &= B_1; \\ A_2 \exp(-\gamma L) &= B_3 \exp(i k L). \end{aligned} \tag{5}$$

Коефіцієнт прозорості бар’єру може бути визначений як відношення ймовірностей перебування частинки за бар’єром та перед ним, тобто

$$D = \frac{|\psi_{III}|^2}{|\psi_I|^2}. \tag{6}$$

Враховуючи вирази (3а) та (5), можемо остаточно записати

* Загалом, при більш строгому розв’язку прирівнювати до нуля можна лише коефіцієнт A_3. Проте і в цьому випадку вираз для коефіцієнта прозорості бар’єру буде мати такий самий вигляд, як і в нашому.

$$D=\frac{\left|B_3\exp(ikx)\right|^2}{\left|B_1\exp(ikx)\right|^2}=\frac{\left|B_3\right|^2}{\left|B_1\right|^2}=\frac{\left|A_2\exp(-\gamma L)\exp(-ikL)\right|^2}{\left|B_1\right|^2}=\exp(-2\gamma L),$$

$$D=\exp\left(-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m\,(U_0-E)}\right).$$

Задача 9. Для 1s-електрону в атомі водню визначити
а) середнє значення його відстані від ядра $<r>$;
б) найбільшу імовірну відстань від ядра $r_{\text{ім}}$ та імовірність P знаходження електрону в області $r<r_{\text{зі}}$.

Розв'язок.

а) Середнє значення фізичної величини F у стані, який описується хвильовою функцією ψ, знаходиться за допомогою формули

$$<F>=\int\psi^*\,\hat{F}\,\psi\;dV,$$

де $\hat{F}$ - оператор фізичної величини. Оператор відстані $\hat{r}=r$, стан 1s-електрону в атомі водню описується функцією $\psi_{1s}=A\exp(-r/r_1)$ (де A – нормувальний коефіцієнт, $r_1=\dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ - константа), тому

$$<r>=\iiint\psi^*_{1S}\;r\;\psi_{1S}\,r^2\sin\theta\;dr\,d\theta\,d\varphi. \qquad (1)$$

У формулі (1) враховано, що у сферичній системі координат $dV=r^2\sin\theta\;dr\,d\theta\,d\varphi$. Перед тим, як проводити обчислення за формулою (1), знайдемо коефіцієнт A використовуючи умову нормування:

$$\iiint\psi^*_{1S}\;\psi_{1S}\,r^2\sin\theta\;dr\,d\theta\,d\varphi=1. \qquad (2)$$

Таким чином

$$1=\iiint A^*\exp(-r/r_1)A\exp(-r/r_1)r^2\sin\theta\;dr\,d\theta\,d\varphi=$$

$$=A^2\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)r^2\,dr=A^2\cdot2\cdot2\pi\cdot\int_0^{\infty}\exp(-2r/r_1)\,r^2\,dr$$

Для знаходження останнього інтегралу використаємо формулу інтегрування по частинах та скористаємось тим, що $\exp\left(-2r/r_1\right)\, dr = -\frac{r_1}{2} d\left(\exp\left(-2r/r_1\right)\right)$:

$$4\pi A^2 \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) r^2\, dr = 4\pi A^2 \left(-\frac{r_1}{2}\right) \int_0^\infty r^2\, d\left(\exp\left(-2r/r_1\right)\right) =$$

$$= -2\pi A^2 r_1 \cdot \left[r^2 \exp\left(-2r/r_1\right)\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) d\left(r^2\right)\right]$$

Перший доданок у дужках , який складається з двох множників, рівний нулеві і на верхній і на нижній границі: на верхній через те що другий множник значно швидше спадає, ніж перший зростає; а на нижній – бо перший множник нуль, а другий обмежений (одиниця). Крім того, $d(r^2) = 2\,d(r)$, тому

$$-2\pi A^2 r_1 \cdot \left[r^2 \exp\left(-2r/r_1\right)\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) d\left(r^2\right)\right] =$$

$$= 4\pi A^2 r_1 \cdot \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) r\, dr = 4\pi A^2 r_1 \cdot \left(-r_1/2\right) \int_0^\infty r\, d\left(\exp\left(-2r/r_1\right)\right) =$$

$$= -2\pi A^2 r_1^2 \cdot \left[r \exp\left(-2r/r_1\right)\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) dr\right] =$$

$$= 2\pi A^2 r_1^2 \cdot \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) dr = 2\pi A^2 r_1^2 \cdot \left(-r_1/2\right) \exp\left(-2r/r_1\right)\Big|_0^\infty = \pi A^2 r_1^3.$$

Таким чином,

$$A^2 = 1\big/ \pi r_1^3 \ . \qquad (3)$$

Скористаємось тепер безпосередньо виразом (1) для знаходження $< r >$ (під час інтегрування застосовуватимуться ті ж самі прийоми, що описані вище):

$$< r > = \iiint A^* \exp\left(-r/r_1\right) r A \exp\left(-r/r_1\right) r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi =$$

$$= \frac{1}{\pi r_1^3} \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) r^3\, dr = \frac{1}{\pi r_1^3} \cdot 2 \cdot 2\pi \cdot \int_0^\infty \exp\left(-2r/r_1\right) r^3\, dr =$$

$$= \frac{4}{r_1^{\ 3}} \cdot \left(-\frac{r_1}{2} \right) \int_0^{\infty} r^3 \, d\left(\exp\left(-2r/r_1 \right) \right) =$$

$$= -\frac{2}{r_1^{\ 2}} \cdot \left[r^3 \exp\left(-\frac{2r}{r_1} \right) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{2r}{r_1} \right) d\left(r^3 \right) \right] =$$

$$= \frac{6}{r_1^{\ 2}} \cdot \int_0^{\infty} \exp\left(-2r/r_1 \right) r^2 \, dr = \frac{6}{r_1^{\ 2}} \cdot \left(-\frac{r_1}{2} \right) \int_0^{\infty} r^2 \, d\left(\exp\left(-2r/r_1 \right) \right) =$$

$$= -\frac{3}{r_1} \cdot \left[r^2 \exp\left(-2r/r_1 \right) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \exp\left(-2r/r_1 \right) d\left(r^2 \right) \right] = \frac{6}{r_1} \int_0^{\infty} \exp\left(-2r/r_1 \right) r \, dr =$$

$$= \frac{6}{r_1} \cdot \left(-\frac{r_1}{2} \right) \int_0^{\infty} r \, d\left(\exp\left(-2r/r_1 \right) \right) = -3 \cdot \left[r \exp\left(-2r/r_1 \right) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \exp\left(-2r/r_1 \right) dr \right] =$$

$$= 3 \cdot \left(-\frac{r_1}{2} \right) \exp\left(-2r/r_1 \right) \Big|_0^{\infty} = \frac{3}{2} r_1$$

$$< r > = \frac{3}{2} r_1 . \tag{4}$$

б) Для знаходження найбільш імовірної відстані необхідно знайти, при яких значеннях r функція, що визначає імовірність $\omega(r, \theta, \varphi) = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV$, приймає максимальне значення, тобто обчислити при яких r функція $\partial \omega(r, \theta, \varphi)/\partial r = 0$. Врахувавши явний вигляд ψ_{1s} можемо записати:

$$\omega(r, \theta, \varphi) = A^2 \exp\left(-2r/r_1 \right) r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi \ ,$$

$$\partial \omega / \partial r = A^2 \left[2r \cdot \exp\left(-2r/r_1 \right) - r^2 \cdot \left(2/r_1 \right) \cdot \exp\left(-2r/r_1 \right) \right] \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = 0 \ ,$$

тобто

$$2r \cdot \exp\left(-2r/r_1 \right) \left[1 - \frac{r}{r_1} \right] = 0 . \tag{5}$$

З рівності (5) видно, що $\partial \omega / \partial r = 0$ при 1) $r = 0$; 2) $r \to \infty$; 3) $r = r_1$. Можна переконатися, що перші два корені відповідають мінімуму функції ω, а третій – максимуму. Тобто

$$r_{\text{зì}} = r_1. \tag{6}$$

Імовірність P знаходження електрону в області $r < r_{\text{зì}}$ може бути обчислена наступним чином:

$$P = \int_0^{r_{\text{зì}}} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_{1S}^{*} \, \psi_{1S} \, dV = \frac{1}{\pi r_1^3} \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{r_1} \exp\left(-\frac{2r}{r_1} \right) r^2 \, dr =$$

$$= 1 - 5\exp(-2) \approx 0.32$$

Задачі для самостійного розв’язку

1. Електрон, початковою швидкістю якого можна знехтувати, пройшов прискорюючу різницю потенціалів *U*. Знайти довжину хвилі де Бройля цього електрону у двох випадках: 1) *U*=51 В, 2) *U*=510 кВ.
2. Кінетична енергія протона $T = 1$ кеВ. Визначити додаткову енергію ΔT, яку необхідно йому надати, щоб його довжина хвилі де Бройля зменшилась в η разів.
3. Кінетична енергія *T* електрона дорівнює подвоєному значенню його енергії спокою. Визначити довжину хвилі λ де Бройля для такого електрона.
4. При якому значенні швидкості електрона його імпульс дорівнює імпульсу фотона з довжиною хвилі $\lambda = 1$ нм?
5. Знайти довжину хвилі фотона, імпульс якого дорівнює імпульсу електрона з кінетичною енергією $T = 0{,}3$ МеВ.
6. При аналізі розсіяння α-частинок (досліди Резерфорда) прицільні відстані приймалися порядку 0,1 нм. Хвильові властивості α-частинок при цьому не враховувались. Чи припустимо це, якщо енергія α-частинок приблизно дорівнювала 7,7 МеВ?
7. Частинка масою *m* рухається в потенціальному полі $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ -U_0, & x \ge 0 \end{cases}$.

   Швидкість частинки в області $x<0$ дорівнює υ_1. Знайти показник заломлення потенціального бар’єру, розташованого при x=0.
8. Розподіл молекул певного газу за модулем їх швидкості описується формулою Максвелла. Запишіть розподіл молекул за дебройлівськими довжинами хвиль та визначте найбільш імовірну довжину $\lambda_{ім}$. При обчисленнях вважати, що температура газу дорівнює *T*, маса однієї молекули - *m*, їх концентрація – *n*.
9. Знайти кінетичну енергію електронів, що падають на діафрагму з двома вузькими щілинами, якщо на екрані, розташованому на відстані $l = 75$ см від діафрагми, відстань між сусідніми максимумами $\Delta x = 7{,}5$ мкм. Відстань між щілинами $d = 25$ мкм.
10. Визначити найбільшу та найменшу довжини хвиль, що відповідають серії Лаймана для атому водню.

11. Користуючись теорією Бора, обчислити радіус n-тої дозволеної орбіти, а також період обертання електрона на ній.
12. Знайти відношення кінетичної та потенціальної енергій електрона, що рухається на n-тій дозволеній за теорією Бора орбіті.
13. На якій збудженій орбіті знаходиться електрон, якщо, повертаючись у основний стан, він може випромінити 5050 різних довжин хвиль.
14. Визначити номер збудженої орбіти, на якій перебував електрон в атомі водню, якщо в результаті поглинання фотону з довжиною хвилі λ, він вилетів за межі атому з кінетичною енергією T.
15. Скільки довжин хвиль де Бройля вкладається на дозволених за теорією Бора електронних орбітах?
16. Знайти комутатор операторів

а) $\hat{A} = x$ та $\hat{B} = \frac{d}{dx}$;

б) $\hat{A} = i\hbar\nabla$ та $\hat{B} = f(\vec{r})$;

в) $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ та $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial y}$;

г) $\hat{A} = 4\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$ та $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial y}$;

д) $\hat{A} = 4y^2$ та $\hat{B} = \frac{d}{dx}$.

17. Знайти оператор, спряжений до добутка двох операторів $\hat{A} \cdot \hat{B}$.
18. Довести самоспряженість оператора а) $\hat{A} = x$; б) $\hat{A} = i\frac{\partial}{\partial y}$.
19. Відомо, що $[\hat{A}, \hat{B}] = 1$. Знайти комутатор $[\hat{A}, \hat{B}^2]$.
20. Довести, що $\hat{A}^{-1}\hat{B}^2\hat{A} = \left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}\right)^2$.
21. Довести наступні рівності: а) $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$; б) $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.

22. Знайти власне значення оператора $\hat{A}$, що належить власній функції ψ_A:

а) $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \quad \psi_A = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$;

б) $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}, \quad \psi_A = \frac{\sin\alpha x}{x}$, де α - стала.

23. Знайти власні функції та власні числа операторів:

а) $\frac{d}{dx}$; б) $i\frac{d}{dx}$; в) $\left(x + \frac{d}{dx}\right)$; г) $\exp\left(ia\frac{d}{d\varphi}\right)$; д) $\frac{d^2}{d\varphi^2}$.

24. Знайти власні значення оператора імпульсу $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ та відповідні власні функції.

25. Побудувати оператор моменту імпульсу $\hat{L}$ у прямокутній декартовій системі координат.

26. Знайти комутатори наступних компонент моменту імпульсу:

а) $[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$;

б) $[\hat{L}_x, \hat{L}_z]$;

в) $[\hat{L}_z, \hat{L}_z]$.

27. Знайти правила комутації наступних операторів: а) $\hat{L}_x$ та $\hat{p}_x$; б) $\hat{L}_x$ та $\hat{p}_y$; в) $\hat{L}_x$ та $\hat{p}_z$.

28. Знайти комутатори оператора квадрату моменту імпульсу $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ з оператором

а) $\hat{L}_x$;

б) $\hat{L}_y$;

в) $\hat{L}_z$.

29. Відомо, що власна функція одномірної системи у певному стані має вигляд $\psi(x) = C\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x\right)$, де a та k_0 – відомі константи.

Знайти:

а) величину константи *C;*

б) середнє значення координати $< x >$ у цьому стані;

в) середнє значення імпульсу $< p >$ у цьому стані;

г) середнє значення квадрату відхилення координати $< \Delta x^2 >$ у цьому стані.

30. Визначити середнє значення фізичної величини, що описується оператором $\hat{L}_z^{\,2}$ в стані, який описується функцією $\psi(\varphi) = C\sin^2\varphi$ (C – невідома константа).

31. Частинка масою m рухається в потенціальному полі $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ -U_0, & x \geq 0 \end{cases}$. Швидкість частинки в області x<0 дорівнює υ1. Знайти показник заломлення потенціального бар'єру, розташованого при x=0.

32. Розподіл молекул певного газу за модулем їх швидкості описується формулою Максвелла. Запишіть розподіл молекул за дебройлівськими довжинами хвиль та визначте найбільш імовірну довжину λім. При обчисленнях вважати, що температура газу дорівнює T, маса однієї молекули - m, їх концентрація – n.

33. На яку кінетичну енергію має бути розрахований прискорювач заряджених частинок масою m, щоб за допомогою потоку даних частинок можна було досліджувати структури з лінійними розмірами l? Провести розрахунки для випадку, коли частинками є електрони та протони, а $l \sim 1$фм.

34. Знайти кінетичну енергію електронів, що падають на діафрагму з двома вузькими щілинами, якщо на екрані, розташованому на відстані $l = 75$см від діафрагми, відстань між сусідніми максимумами $\Delta x = 7{,}5$мкм. Відстань між щілинами $d = 25$мкм.

35. Кінетична енергія електрона в атомі водню складає величину порядку $K = 10$ еВ. Використовуючи співвідношення невизначеності, оцінити мінімальні лінійні розміри атому.
36. Визначити відносну невизначеність $\Delta p / p$ імпульсу рухомої частинки, якщо припустити, що невизначеність її координати дорівнює довжині хвилі де Бройля.
37. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну кінетичну енергію електрону, що рухається всередині сферичної області діаметром $d = 0{,}1$ нм.
38. Атом випроменив фотон з довжиною хвилі $\lambda = 0{,}58$ мкм за час $\tau \approx 10^{-8}$ с. Оцінити невизначеність Δx, з якою можна визначити координату фотону в напрямі його руху, а також відносну невизначеність його довжини хвилі.
39. Деяка система знаходиться у стаціонарному стані, який описується хвильовою функцією $\Phi(x,t)$. Чи буде залежати від часу густина ймовірності знайти систему у точці з координатою х?
40. Знайти власні значення енергії та хвильову функцію вільної частинки.
41. Визначити густину ймовірності знайти частинку в точці з координатою х, якщо її хвильова функція а) $\psi(x,t) = C\exp(ik\,x)$; б) $\psi(x,t) = C[\exp(ik\,x) + \exp(-ik\,x)]$, де С – стала.
42. Частинка, яка перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі, знаходиться в основному стані. Яка ймовірність виявлення частинки: а) в середній третині ящика; б) в крайній третині ящика?
43. Частинка, яка перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною $2a$ знаходиться у збудженому стані, який характеризується квантовим числом $n = 3$. Визначити, в яких точках інтервалу $[-a, a]$ густина ймовірності знаходження частинки має максимальне і мінімальне значення.
44. Електрон знаходиться в прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Ширина ями $2a = 0.2$ нм, енергія

електрона - $E = 37.8$ еВ. Визначіть номер n енергетичного рівня і модуль хвильового вектора $\vec{k}$ електрону.

45. Електрон знаходиться в нескінченно глибокій одномірній прямокутній потенціальній ямі шириною $2a$. В яких точках інтервалу $[-a, a]$ густина ймовірності знаходження електрона на другому та третьому енергетичному рівнях однакові? Розв'язок пояснити графічно.
46. Частинка, яка перебуває в нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі, який характеризується квантовим числом $n = 2$. Яка ймовірність виявити частинку в крайній чверті ящика?
47. У скільки разів змінюється енергія частинки після її тунелювання через потенціальний бар'єр висотою U та шириною l?
48. Частинка масою m перебуває в основному стані у потенціальному полі $U = kx^2/2$, а її хвильова функція має вигляд: $\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2)$, де A – коефіцієнт нормування, α - додатна стала. За допомогою рівняння Шрьодінгера знайти величину α та енергію частинки у цьому стані.
49. Електрон в атомі водню знаходиться в основному стані, що описується хвильовою функцією $\psi = A\exp(-r/r_1)$. За допомогою рівняння Шрьодінгера знайти енергію E електрона та величину r_1 .
50. Визначити для $1s$-електрона в атомі водню середні значення його квадрату відстані від ядра $< r^2 >$ та квадрату середнього відхилення $< (r - < r >)^2 >$.
51. Знайти для $2p$- та $3d$-електронів в атомі водню а) найбільш ймовірну відстань від ядра; б) середнє квадратичне відхилення $< (r - < r >)^2 >$.
52. Побудувати можливі терми для наступних електронних конфігурацій

а) np^1d^1;
б) ns^1d^1;
в) nd^1f^1;

г) $n\,p^2$;
д) $n\,d^2$;
е) $n_1\,s^1\,n_2\,p^2$;
є) $n_1\,p^1\,n_2\,p^2$.

53. Знайти максимально можливий повний механічний момент та відповідне спектральне позначення терма атому
а) Na, валентний електрон якого має головне квантове число 4;
б) з електронною конфігурацією $1\,s^2\,2\,p^1\,3\,d^1$.

54. Знайти можливі значення повних механічних моментів атомів, які знаходяться в стані
а) ^4P;
б) ^5D.

55. Відомо, що у F-стані кількість можливих значень квантового числа J дорівнює п'яти. Визначити спіновий механічний момент в цьому стані.

56. Атом знаходиться у стані, мультиплетність якого дорівнює трьом, а повний механічний момент – $\hbar\sqrt{20}$. Яким може бути відповідне квантове число L?

57. Використовуючи правила Гунда знайти основний терм атома, електронна конфігурація незаповненої підоболонки якого
а) $n\,d^2$;
б) $n\,d^3$;
в) $n\,f^{10}$;
г) $n\,f^4$.

58. Користуючись правилами Гунда написати основний терм атома, єдина незаповнена підоборонка якого містить третину від можливого числа електронів і $S = 1$.

59. Скориставшись правилами Гунда, знайти число електронів у єдиній незаповненій підоболонці атома, основний терм якого
а) $^3F_2$;
б) $^2P_{3/2}$;
в) $^6S_{5/2}$.

60. Схематично намалювати енергетичні рівні, пов'язані з термами $^1D_2$ та $^1P_1$ за відсутності магнітного поля та при його наявності. Вказати можливі переходи.

61. Визначити фактор Ланде для наступних термів:

а) $^5F_2$;
б) $^5P_1$.

62. Визначити спіновий механічний момент атому в стані D_2, якщо максимальне значення проекції магнітного моменту при цьому дорівнює чотирьом магнетонам Бора.

63. Атом знаходиться в магнітному полі з індукцією $B = 0{,}25$ Тл. Підрахувати повну величину розщеплення терма
а) ^1D;
б) $^3F_4$.

64. Підрахувати дефект маси та енергію зв'язку ядра $^7{}_3$Li.

65. Знайти енергію зв'язку ядра, яке має однакове число протонів та нейтронів та радіус, у 1,5 разів менший за радіус ядра ^{27}Al.

66. Вважаючи, що при одному поділі ядра ^{235}U вивільняється енергія 200 МеВ, визначити
а) енергію, що виділяється при згорянні 1 кг ізотопу ^{235}U та масу вугілля з питомою теплотою згорання 30 кДж/г, еквівалентну 1 кг ізотопу ^{235}U;
б) масу ізотопу ^{235}U, що поділився під час вибуху атомної бомби з тротиловим еквівалентом 30 кілотон, якщо тепловий еквівалент тротилу 4,1 кДж/г.

67. Записати позначення яких не вистачає в наступних ядерних реакціях
а) ^{10}B (x, α) ^{8}Be;
б) ^{16}O (d, n) X;
в) ^{23}Na (p, x) ^{20}Ne;
г) X (p, n) ^{37}Ar.

68. При зіткненні α-частинки з ядром бора $^{10}_{5}\mathrm{B}$ відбулася ядерна реакція, в результаті якої утворилось два нових ядра. Одним з цих ядер було ядро атому водню $^{1}_{1}\mathrm{H}$. Визначити другу ядро, написати символічно реакцію, визначити її енергетичний ефект.

69. Внаслідок радіоактивного розпаду $^{238}_{92}\mathrm{U}$ перетворюється у $^{206}_{82}\mathrm{Pb}$. Скільки α- та β-розпадів має місце у цьому випадку.

70. Визначити частку атомів радіоактивного стронцію $^{90}_{38}\mathrm{Sr}$, що розпалися на протязі
а) 12 років;

б) 100 років.

Вважати, що період напіврозпаду стронцію $T_{1/2}$ = 27 років.

71. На сьогодні у природньому урані міститься 99,28% ^{238}U та 0,72% ^{235}U. Підрахувати вік Землі, якщо припустити, що у момент утворення планети кількості обох ізотопів були однакові. Вважати, що періоди напіврозпаду $T_{1/2}$ (^{238}U) = $4{,}5\cdot10^9$ років, $T_{1/2}$ (^{235}U) = $7{,}1\cdot10^8$ років.

72. Активність деякого препарату зменшується в $n = 2{,}5$ разів за $t = 7$ діб. Знайти його період напіврозпаду.

73. Визначити початкову активність радіоактивного препарата магнію ^{27}Mg масою $m = 2\cdot10^{-10}$ кг, а також його активність через час $t = 6$ год. Період напіврозпаду препарату $T_{1/2}$ = 10 хв.

ДОДАТОК. Хвильові функції електрона у кулонівському полі для $n = 1 \div 3$

Квантові числа			$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$
n	l	m_l	
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{Z}{r_0}r\right)$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \exp\left(-\frac{Z}{2r_0}r\right)$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \exp\left(-\frac{Z}{2r_0}r\right) \cdot \cos\theta$
2	1	+1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \exp\left(-\frac{Z}{2r_0}r\right) \cdot \sin\theta \cdot \exp(i\varphi)$
2	1	-1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \exp\left(-\frac{Z}{2r_0}r\right) \cdot \sin\theta \cdot \exp(-i\varphi)$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(27-18\frac{Z}{r_0}r+2\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right)$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \frac{Z}{r_0}r \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right) \cdot \cos\theta$
3	1	+1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \frac{Z}{r_0}r \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right) \cdot \sin\theta \cdot \exp(i\varphi)$
3	1	-1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Z}{r_0}r\right) \cdot \frac{Z}{r_0}r \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right) \cdot \sin\theta \cdot \exp(-i\varphi)$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2 \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right) \cdot \left(3\cos^2\theta-1\right)$
3	2	+1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2 \cdot \exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right) \cdot \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot \exp(i\varphi)$

3	2	-1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2\cdot\exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right)\cdot\sin\theta\cdot\cos\theta\cdot\exp(-i\varphi)$
3	2	+2	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2\cdot\exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right)\cdot\sin^2\theta\cdot\cos\theta\cdot\exp(i2\varphi)$
3	2	-2	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Z}{r_0}r\right)^2\cdot\exp\left(-\frac{Z}{3r_0}r\right)\cdot\sin^2\theta\cdot\cos\theta\cdot\exp(-i2\varphi)$

ЛІТЕРАТУРА

Основна

1. Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц – М. : ГИФМЛ "Наука", 1963. – Т.3 – 704 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев – М. : ГРФМЛ "Наука", 1976. – 670 с.
3. Савельев И.В. Основы теоретической физики / И.В. Савельев – М. : ГРФМЛ "Наука", 1977. – Т.2 – 352 с.
4. Федорченко А.М. Теоретична фізика. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. Т.2./ Федорченко А. М. – Київ: Вища школа, 1993. – 378 с.
5. Вакарчук І.О. Квантова механіка / І.О. Вакарчук. – Львів: Вид-во ЛДУ, 1998. – 617 с.
6. Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: ГРФМЛ "Наука", 1973. – 704 с.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Атомная и ядерная физика. Ч.1./ Д.В. Сивухин . – М.: "Наука", 1984. – 416 с.
8. Шпольский Э.В. Атомная физика / Э.В.Шпольский – М.: "Наука", 1984. – Т. 1, 2.
9. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н.Ф. Степанов – М. Изд-во "Мир", 2001. – 519с.

Додаткова

1. Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики / Макс Джеммер. ; пер. с англ. В.Н. Покровского, под ред. Л.И. Пономарева – М: ГРФМЛ "Наука", 1985.– 380 с.
2. Де Бройль Л. Соотношения неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация квантовой механики / Л. Де Бройль. – М.: "Мир", 1986. – 340с.
3. Алексеев И.С. Концепция дополнительности / И.С. Алексеев, М.А. – М. : Изд-во "Наука", 1978. – 276 с.
4. Блохинцев Д.И. Принципиальные вопросы квантовой механики / Д.И. Блохинцев – М. : ГРФМЛ "Наука", 1987. – 152 с.
5. Гольдин Л.Л. Квантовая физика. Вводный курс. / Л.Л. Гольдин, Г.И. Новикова – Ижевск : АНО ИКС, 2002. – 490 с.
6. Карлов Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 360 с.

7. Мартинсон Л.К. Квантовая физика / Л.К. Мартинсон, Е.В. Смирнов. – М.: Изд-во МГТУ, 2004. – 496 с.
8. Барабанов А.Л. Квантовая механика / А.Л. Барабанов. – М. Изд-во МФТИ, 2005. – Ч. 1,2.