# Лекція 3. Модельні кваннтово – механічні задачі

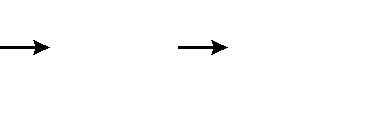
### 3.1 Рівняння Шрьодінгера

При розгляді руху частинки основним завданням є визначення її місцеположення в будь-який момент часу. В механіці Ньютона воно вирішується шляхом розв’язування основного рівняння класичної механіки  диференціального рівняння, яке виражає другий закон Ньютона:

d2*r*

d*t*2

 *F* *r* ,*t* .

*m*



Інтегруванням цього рівняння, можна визначити закон руху

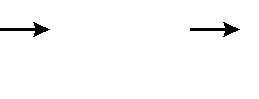
*r*  *r* *t* , а

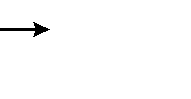
по тому й рівняння імпульсу частинки

*p**t*   *m*d*r*

d*t*  . Тому для класичної

частинки можна точно встановити положення та імпульс у будь-який момент часу, а відтак й інші величини, що визначають її механічний стан. Але для

мікрочастинки можна говорити не про точні значення *r* i *p* у кожен момент

часу, а тільки про ймовірності їхніх можливих значень. Ця та інша інформація про стан частинки, тому основним завданням квантової механіки

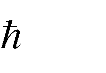
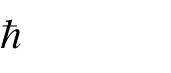
є визначення хвильової функції силовому полі.

(*r* ,*t*)

частинки, що рухається в заданому

Існують різні підходи й математичні методи вирішення цього завдання

і, відповідно, – різні версії квантової механіки. Найпростішою й наочною є так звана хвильова механіка, що ґрунтується на *рівнянні Шрьодінгера*  диференціальному рівнянні, яке задовольняє хвильова функція частинки в загальному випадку. В декартових координатах воно має вигляд:



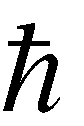
|  |  |
| --- | --- |
| 2  2  2  2          2*m*  *x*2 *y*2 *z*2  *U i* *t* .    | (3.1) |

Тут

  (*x*, *y*, *z*,*t*)

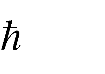
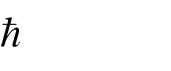
- хвильова функція частинки; *U* = *U*(*x*,*y*,*z*,*t*) - функція

потенціальної енергії частинки, що визначає силове поле, в якому вона

знаходиться; *i*   уявна одиниця;  стала Планка, *m*  маса частинки.

1

Рівняння (4.1) можна записати згорнуто та інваріантно відносно вибору системи координат через оператор Лапласа1:



|  |  |
| --- | --- |
| 2         2 *U i* .  2*m* *t* | (3.2) |

Стосовно цього рівняння відразу слід зауважити таке. По-перше, його не можна вивести математично з якихось інших формальних положень, тому

*рівняння Шрьодінгера (3.2) є основним рівнянням квантової (хвильової) механіки*,

тобто  постулатом, вірогідність якого доводиться тим, що його наслідки підтверджуються дослідом. По-друге, механіка Шрьодінгера є нерелятивістською теорією, тобто, рівняння (3.2) не є чинним при швидкостях сумірних із граничною швидкістю *с*.

У квантовій механіці важливе місце посідає дослідження частинок, які знаходяться в стаціонарних (не залежних від часу) силових полях *U* = *U*(*x,y,z*). У цьому випадку розподіл імовірностей для величин, які визначають стан частинки, теж є стаціонарним і, як доводиться в математиці, хвильову функцію частинки можна записати у вигляді:

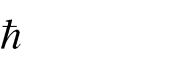
|  |  |
| --- | --- |
| (*x*, *y*, *z*,*t*) ** (*x*, *y*, *z*,)*e**it* , | (33) |

де **  *E*

, **  *x*, *y*, *z* 

– “координатна” хвильова функція, що

підлягає визначенню.



, *i*  1

Підстановка цього виразу в рівняння (3.1) після нескладних викладок дає так зване *стаціонарне рівняння Шрьодінгера*:



|  |  |
| --- | --- |
| 2**  2*m*  *E*  *U* **  0,  2 | (3.4) |

де *Е*  повна енергія частинки.

Слід зазначити, що інтегрування рівнянь (3.2) і (34) звичайно пов’язане з великими математичними труднощами. Тому далі повний розгляд проводиться тільки для деяких найпростіших задач, які дозволяють зрозуміти загальні риси поведінки мікрочастинок і специфіку квантовомеханічного способу їх дослідження

Частинка в одновимірному потенціальному ящику

***Постановка задачі*.** Уявимо маленьку пружну кульку, котра рухається без тертя всередині ящика у вигляді прямого паралелепіпеда з абсолютно жорсткими непроникними стінками, що лежить на горизонтальній площині. За таких умов усередині ящика кулька рухається, як вільна частинка, і зіткнення зі стінками відбуваються пружно, без зміни величини імпульсу та

кінетичної енергії. Задля спрощення викладок будемо вважати, що рух відбувається вздовж одного з ребер ящика довжини *l*.

При пружному зіткненні із непроникною стінкою ящика кінетична енергія кульки, якою б вона не була, повністю переходить у потенціальну енергію пружної деформації, а потім на стадії відскоку відновлюється до вихідної величини. Але при необмеженій жорсткості стінок деформації є гранично малими, тому перетворення енергії відбуваються в одній точці  точці дотику кульки до стінки ящика. В такому разі можна вважати, що потенціальна енергія кульки *U*(*х*) скрізь всередині ящика дорівнює нулю, а на стінках стрибком зростає і може бути якою завгодно, як показано на рис. 4.1. Отже, можна говорити, що частинка в ящику рухається в такому силовому полі, де її потенціальна енергія *U =* 0 в області шириною *l* і *U*  за її межами. Фраза досить громіздка. Тому для характеристики типових силових полів використовують відповідні жаргонні те6рміни. Зокрема, описане поле називають *потенціальним ящиком* або *потенціальною ямою з нескінченно високими вертикальними стінками.*

*U*

0 *l* X

### Рис. 3.1

Характеристики руху кульки в ящику  енергія та імпульс  ніяк не залежать від її маси та розмірів ящика. Вони задаються із зовні при приведенні кульки в рух. Це стосується й мікрочастинки за умов, коли вона не виявляє квантових властивостей. Приміром, енергія молекул газу в посудині визначається не розмірами посудини чи масами молекул, а температурою газу.

Але поведінка мікрочастинки, що заперта в мікроскопічному “ящику”, не є очевидною. Вона підпорядкована законам не класичної, а квантової механіки, і її треба розглядати на основі рівняння Шрьодінгера (3.4). Складемо його, спрямувавши координатну вісь ОХ уздовж напрямку руху

частинки. В такому разі хвильова функція є функцією тільки однієї змінної

**  *x* і 2**  d2** / d *x*2 . Через непроникність стінок частинка не може

опинитися за межами ящика ні за яких умов. Отже, хвильова функція існує

тільки в області *x* 0; *l*, де *U*(*х*) = 0. Тому рівняння (3.4.4) має вигляд:

|  |  |
| --- | --- |
| d2**  2**   *k* 0,  d *x*2 | (3.5) |

де

|  |  |
| --- | --- |
| *k* 2  2*mE* .  2 | (3.6) |

При цьому з вимоги неперервності хвильової функції випливає, що вона дорівнює нулю не тільки за межами ящика, а й на його стінках:



|  |  |
| --- | --- |
| ** (0) ** (*l*)  0. | (3.7) |

***Хвильові функції. Квантові стани*.** З математики відомо, що розв’язками рівняння (4.5) є гармонічні функції, тож можна записати:

|  |  |
| --- | --- |
| ** (*x*)  *A*sin(*kx*  **), | (3.8) |

де *А* та **  довільні константи (сталі інтегрування). Але з усієї множини розв’язків (4.8) хвильовими функціями частинки є лише ті, що задовольняють вимоги однозначності, неперервності та обмеженості.

Усі функції (3.8) є однозначними та обмеженими, але неперервними з

них є лише ті, що задовольняють умови (3.7). При цьому з умови ** 0  0

випливає

*A*sin**  0 **  0 , отже

|  |  |
| --- | --- |
| ** (*x*)  *A*sin *kx*. | (3.9) |

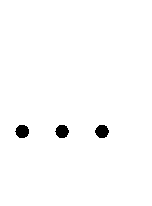
А з другої умови ** *l*   0 , маємо:

sin *kl*  0  *kl*  * n* .

Отже, параметр *k* може мати лише дискретні значення

|  |  |
| --- | --- |
| *k *  *n*  *l n* , *n* = 1, 2, 3, ... , | (3.10) |

і зі всієї множини розв’язків (3.8) хвильовими функціями частинки є лише окремі (дискретні) функції

** (*x*)   *A*sin * x n* , *n*  1, 2, .

*n*  *l* 

 

Відмітимо, що у множині чисел *n* відсутнє значення *n* = 0, хоча формально воно задовольняє вимозі ** (*l*)  0. Це й зрозуміло, адже при *n* = 0

хвильова функція

** 0  *x*  0

при будь-якому значенні *х*, що означає

відсутність частинки.

Амплітуди *А* хвильових функцій визначаються з умови нормування

(3.7):

*l*  * x* 

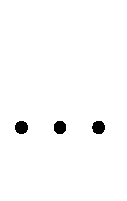
*A*2*l*

2

*l*

*A*2 sin2  *n* d *x*  1   1  *A*  .

0  *l* 2

Таким чином, *хвильові функції частинки в ящику утворюють дискретний набір*:

|  |  |
| --- | --- |
| ** ( *x*)   2 sin  * x n* , *n*  1, 2, 3,  *n l*  *l*     | (3.11) |

Хвильова функція повністю визначає стан мікрочастинки. Тому дискретність функцій (3.11) означає, що для частинки в ящику можливі не будь-які, а лише в окремі дозволені стани. Це явище називається *квантуванням*, а самі дозволені стани – *квантовими станами*.

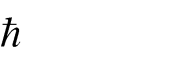
***Енергетичний спектр*.** Кожна хвильова функція * n*

і кожен квантовий

стан частинки в ящику визначається відповідним значенням параметра

*kn* ,

який пов’язаний із енергією частинки формулою (4.6). Тому, врахувавши вираз (4.10), отримаємо:



|  |  |
| --- | --- |
| ** 2 2 2  *En*  2*ml* 2 *n* , *n*  1, 2, 3, ... | (3.12) |

Отже, енергія частинки в ящику теж є квантованою: в кожному дозволеному стані вона може мати тільки відповідне значення з набору (3.12), який називається *енергетичним спектром* частинки. Кожне дозволене значення

енергії

*En* утворює відповідний *енергетичний рівень*, а число *n* називається

*квантовим числом* цього рівня. Наочно енергетичні рівні зображують горизонтальними відрізками на енергетичній діаграмі (рис. 4.2а).

Іншою особливістю енергетичного спектра (4.12) є те, що найнижчий енергетичний рівень не дорівнює нулю:



|  |  |
| --- | --- |
| ** 2 2  *E*1  2*ml*2 . | (3.12*а*) |

Оскільки енергія частинки в ящику є чисто кінетичною, це означає, що частинка ні за яких умов не може перебувати у стані спокою. Такий висновок є дуже дивним для класичної механіки, але він повністю узгоджується із принципом невизначеності. Справді, якщо частинка нерухома, то її імпульс відомий точно: *р* = 0, і невизначеність імпульсу *р* = 0. Але це суперечить співвідношенням Гайзенберга ,+оскільки невизначеність координати

частинки в ящику

*x*  *l* , то повинно бути

*p* 

*l* . Якщо прийняти

мінімальний імпульс частинки

*p*min ~

то для

мінімальної енергії частинки отримаємо величини узгоджується з виразом (3.12*а*).



*l*

*E*min ~

2 2*ml*2 , що за порядком

*E* |** |



*E*3

*E*2 *E*1

3

2

1

2

3

2

1

0 *l*

***а*) *б*)**

**Рис. 3.2**

Розглянуті особливості поведінки частинок не спостерігаються в класичній механіці, навіть якщо йдеться про рух мікроскопічних частинок, наприклад, молекул газу в посудині. Для з’ясування причин цього оцінимо

найменшу можливу кінетичну енергію

*E*1 та швидкість руху

*v*1 електрона

( *m*  1030 кг ) в ящику ширини

*l*  1010 м

і молекули кисню O2

( *m*  5,31026 кг ) в посудині розміром *l* = 10 см.

Для електрона маємо:

*mv*2

3,142 1,052 1068

18 6

*E*1  1 

  6 10 Дж  37еВ, і

*v*1  3,6 10 м с.

2 2  9,110 31 1020

Це дуже багато. Наприклад, величина

*E*1 більш ніж у 100 разів перевищує

енергію теплового руху частинок при кімнатній температурі. Натомість аналогічні розрахунки для молекули кисню в посудині дають недоступні для

спостереження величини

*E* 1040 Дж

і *v*1

 6 108 м с .

Сказане стосується й дискретності енергетичного спектра. Для

1

переведення електрона в ящику ширини

1010 м

з першого на другий рівень

необхідно надати йому енергію ~ 100 еВ (в атомі водню

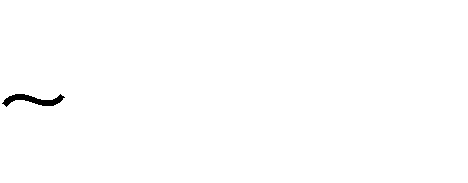
 10 еВ ). Ця

величина відповідає енергії фотонів жорсткого ультрафіолетового

випромінювання і в

~ 104

разів перевищує середню енергію, якою

обмінюються частинки внаслідок теплового руху. А для молекули О2 в

посудині розміром *l* = 10 см треба всього

1021 еВ , тобто, ні про яку

дискретність рівнів говорити не доводиться. Зауважимо також, що фактична відсутність квантових властивостей у молекули газу зумовлена макроскопічними розмірами ящика (посудини), в якому знаходиться молекула.

***Рух частинки в ящику*.** Частинка в ящику рухається між стінками із сталою швидкістю. Тому класична частинка (кулька) в усіх точках, окрім стінок, буває однаково часто, тобто з однаковою імовірністю. Біля стінок ця імовірність більша, оскільки під час зіткнення частинка витрачає певний час на гальмування та наступний розгін при відскоку. А от квантова частинка і в цьому відношенню поводиться інакше. Згідно з (3.11), густина ймовірності перебування частинки в заданій точці ящика визначається функцією

**  *x* 2  2 sin2 * nx l*  .

*l*

Із цього виразу випливає, що для квантової частинки в ящику існують

точки, в яких

** 2  0 . Положення таких точок визначається умовою

* nxi l*

 *i*

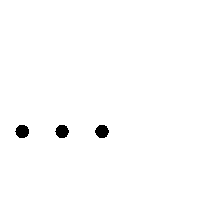
 *xi*

 *i* ,

*n*

*l*

*i*  0, 1, 2, *n* .

Наявність таких точок ілюструє рис. 4.2б, на якому зображено графік

**  *x*  2

для трьох перших квантових станів частинки в ящику.

Таким чином для всіх станів, окрім першого (*n* = 1), *всередині* ящика є точки, в яких частинку не можна виявити *ні за яких умов*. Така поведінка частинки є несумісною з поняттям руху по заданій траєкторії. Але її можна

збагнути на основі хвильових уявлень. А саме. Енергія частинки в ящику є чисто кінетичною

2

*p*

*E*  **,**

2*m*

тож зробивши таку заміну у виразі (3.6), отримаємо:

*k* 2  *p*

2

*p* 2** ,

де, ** – дебройлівська довжина хвилі частинки. Це означає, що параметр *k* в рівнянні (3.9) є хвильовим числом дебройлівських хвиль, які разом із частинкою поширюються в ящику і відбиваються від його стінок. Але теорія хвиль говорить20, що між двома відбиваючими стінками



2

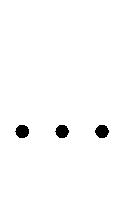


*k*     **

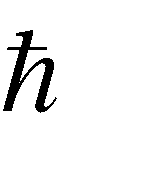
можуть існувати лише хвилі із дискретними довжинами

*n* , при накладанні

яких утворюються стаціонарні стоячі хвилі. При цьому на відстані між стінками має укладатися ціла кількість півхвиль:

*l*  *n *n  **  2*l* , *n*  1, 2, 3, .

2 *n n*

І якщо підставити сюди співвідношення де-Бройля, то для імпульсу частинки вийде

|  |  |
| --- | --- |
| *p*  * n* ,  *n l* | (3.13) |

а для енергії –

*En*  ,



** 2 2

2*ml*2 *n*

2

що співпадає з виразом 3.12). Отже, ефект квантування станів можна трактувати як наслідок утворення стоячих дебройлівських хвиль при

відбиванні частинки від стінок ящика. При цьому точки, в яких вузлами вказаних стоячих хвиль.

**  *x*  2  0 , є

На завершення зазначимо, що хвильове поле на кшталт асоційованих із частинкою стоячих хвиль із дискретним набором довжин хвилі утворюється

20 Про це можна прочитати в будь-якому підручнику з фізики для вишів.

не лише при вільному русі частинки між перпендикулярними до напрямку руху «стінками», а й у більш складних силових полях, які утримують частинку в обмеженій області простору. Відповідно, стани частинки теж квантуються, але хвильові функції та правила квантування є складнішими. Отже,

*квантування станів є універсальним ефектом і спостерігається завжди, коли мікрочастинка може рухатися тільки в обмеженій області простору.*

Одним із проявів цього ефекту є дискретність станів електронів в атомах, які утримуються в колі ядра кулонівською силою.

Таким чином, у квантовій механіці існування дискретних дозволених станів електронів у атомах не постулюється, як в теорії Бора, а природньо випливає з основного рівняння квантової механіки.

### Частинка у тривимірному ящику

***Квантові стани*.** Розглянемо тепер випадок, коли частинка перебуває в тривимірному ящику з ребрами *l*1, *l*2, *l*3 рис. 4.3 і може в ньому вільно рухатись у будь-якому напрямку. В цьому випадку її хвильова функція є

функцією трьох змінних  *x*, *y*, *z* , тож рівняння Шрьодінгера має вигляд:



|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 2**  *x*2 |  | 2**   *y*2 | | 2**  2  *z*2 *k * |  | 0, | *k* | 2 |  | 2*mE*  2 | . | (3.14) |
| *l*2  Z | | | *l*3 | Y  *l*1 | X | | | | | | |  |

Це рівняння легко розв’язується методом поділу змінних. А саме. Всередині ящика *U*(*x, y, z*) = 0, і ніякі сили на частинку не діють. Тому координати частинки є незалежними: на можливі значення однієї з них ніяк не впливають дві інші. На мові теорії ймовірностей те, що частинка має задане значення однієї координати при будь-яких інших, є незалежною простою подією, а ймовірність перебування частинки в заданому місці, тобто

того, що вона одночасно має задані значення всіх трьох координат, є складною подією. При цьому в теорії доводиться, що ймовірність складної події дорівнює добутку імовірностей простих незалежних подій, з яких вона

«складається». Це враховуючи ймовірнісний зміст хвильової функції, дозволяє шукати розв’язки рівняння розв’язки рівняння (3.14) у вигляді добутку “однокоординатних” функцій, кожна з яких визначає положення частинки тільки відносно однієї координатної осі:

** (*x*, *y*, *z*) **1(*x*) ** 2 ( *y*) ** 3 (*z*).

Тоді, підставляючи цей вираз у рівняння (4.14), отримуємо:

|  |  |
| --- | --- |
| * * d ** * * d ** * * d **   2*  *   2 2 2  1 2 3 *k*  2 3 d *x*2 1 3 d *y*2 1 2 d *z*2 1 2 3  1 d2** 1 d2** 1 d2**  1  2  3  *k* 2.  ** d *x*2 ** d *y*2 ** d *z*2 1 2 3 | (3.15) |

Ця рівність містить не числа, а функції

**1  *x*,** 2  *y* ,**3 *z*

і має бути

чинною при всіх значеннях змінних *x, y, z*. А це можливо лише за умови, що аналогічні рівності виконуються окремо для кожної з функцій:

1 d2 **

  2

1

1 d2 **

2 1 d2 **2

2

3

** d *x*2

*kx* ;

** d *y*2

 *ky* ;

** d *z*2

 *kz* ,

або

1 2 3

|  |  |
| --- | --- |
| d2 **   1  *k* 2**  0;   d *x*2 *x* 1  d2 **  2**    2 *ky* 2 0;   d *y*2  d2 **   3  *k* 2**  0.   d *z*2 *z* 3 | (3.16) |

При цьому, відповідно до (3.15), параметри умову:

*kx* , *ky* , *kz*

повинні задовольняти

|  |  |
| --- | --- |
| *k*2  *k*2  *k*2  *k*2.  *x y z* | (3.17) |

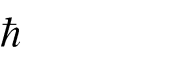
Як бачимо, вихідне рівняння (3.14) трансформувалося в систему з трьох “однокоординатних” рівнянь (3.16), кожне з котрих є ідентичним рівнянню (3.5) з усіма наслідками. Зокрема, однокоординатні хвильові функції мають вигляд (3.11), відповідно до чого повні хвильові функції частинки в тривимірному ящику виражаються, як

|  |  |
| --- | --- |
| ** ( *x*, *y*, *z*)  8 sin  * x n*  sin  * y n*  sin  * z n* .  *l l l*  *l* 1   *l* 2   *l* 3   1 2 3  1   2   3  | (3.18) |

Так само енергія частинки, згідно з (3.12) , виражається, як

*x y z*

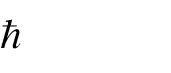
2



*E* 

2*m*

або, враховуючи вираз (3.10, як



*k* 2  *k* 2  *k* 2 ,

|  |  |
| --- | --- |
| ** 2 2  *n*2 *n*2 *n*2   *E*   1  2  3 , *n*1, *n*2 , *n*3  1, 2, 3, ... ,  2*m*  *l* 2 *l* 2 *l* 2   1 2 3 | (3.19) |

де квантові числа

*n*1,

*n*2 ,

*n*3 *не залежать одне від одного*.

Вираз (3.19) є досить прозорим. Якщо в ньому розкрити дужки і врахувати співвідношення (3.13), то вийде:

 *p*2  *p*2  *p*2  *p*2

*x y z*





*E* ,

2*m* 2*m*

де  *px* , *py* , *pz*  – проекції, а *p* – модуль імпульсу частинки.

Це висвітлює фізичний зміст проведеної для розв’язування рівняння (3.14) процедури поділу змінних. Вона по суті означає типовий для механіки поділ руху частинки в довільному напрямі на три складові рухи уздовж координатних осей. При цьому кожна однокоординатна хвильова функція **1 ,

** 2 , або ** 3

визначає один із таких рухів.

***Виродження*.** Можливість руху в довільному напрямку урізноманітнює квантові стани частинки в тривимірному ящику й ускладнює її енергетичний спектр. Для спрощення розглянемо окремий випадок частинки в кубічному ящику, коли *l*1  *l*2  *l*3  *l* , і енергетичні рівні (3.19) визначаються формулою



** 2 2

2*ml* 2 .

2 2 2

*E*  *E*0 (*n*1  *n*2  *n*3 ), *E*0 

Відповідно до цього виразу в таблиці 1 подані енергії та значення квантових чисел для декількох перших енергетичних рівнів частинки в кубічному ящику.

Таблиця 1.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Рівень | Енергія | Квантові числа | | | Кратність  *К* |
| *n*1 | *n*2 | *n*3 |
| 1 | 3*Е*0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
|  |  | 2 | 1 | 1 |  |
| 2 | 6*Е*0 | 1 | 2 | 1 | 3 |
|  |  | 1 | 1 | 2 |  |
|  |  | 2 | 2 | 1 |  |
| 3 | 9*Е*0 | 1 | 2 | 2 | 3 |
|  |  | 2 | 1 | 2 |  |
|  |  | 3 | 1 | 1 |  |
| 4 | 11*Е*0 | 1 | 3 | 1 | 3 |
|  |  | 1 | 1 | 3 |  |
| 5 | 12*Е*0 | 2 | 2 | 2 | 1 |

Впадає в око, що для деяких рівнів є декілька наборів чисел

*n*1, *n*2 , *n*3 , отже, і

хвильових функцій (3.18) та квантових станів частинки. різним значенням проекцій імпульсу, тож і

*Різні квантові стани, що відповідають одному й тому самому енергетичному рівню, як і самі такі рівні, називаються виродженими.*

Відповідно,

*кількість станів із заданим значенням енергії називається кратністю виродження К енергетичного рівня. Для невиродженого рівня К* = *1*.

Кратності виродження розглянутих рівнів частинки в тривимірному ящику вказані в останній колонці табл. 1.

Виродження станів квантової частинки в ящику є дуже специфічним ефектом. При кожному значенні енергії та імпульсу існує тільки *К* різних

комбінацій чисел

*n*1, *n*2 , *n*3

і проекцій (3.13) імпульсу на осі. А це означає, що,

хоча всередині ящика на частинку не діють ніякі сили, для неї є лише декілька дозволених напрямків руху. Класична частинка (кулька) за таких

умов може рухатися з в будь-якому з нескінченної кількості напрямків. Тому в класичній механіці поняття виродження станів є позбавленим змісту.

Зауважимо також, що ефект виродження станів є типовим і відіграє істотну роль у різних фізичних явищах у різних квантових системах.