

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Київський національний університет будівництва і архітектури

**І. О. Азнаурян**

**ФІЗИЧНІ ОСНОВИ  
КВАНТОВИХ КОМП'ЮТЕРІВ**

Конспект лекцій

для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти  
за спеціальностями 123 «Комп'ютерна інженерія»,  
125 «Кібербезпека та захист інформації»,  
для здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти  
за спеціальністю 015.10 «Професійна освіта.  
Комп'ютерні технології» та усіма формами навчання

Київ 2025

УДК 53(075)

A35

Рецензент Є. Є. Шабала, канд. техн. наук, доцент кафедри кібербезпеки та комп'ютерної інженерії

*Затверджено на засіданні кафедри фізики (протокол №5 від 18 лютого 2025 року)*

В авторській редакції.

**Азнаурян І.О.**

A35 Фізичні основи квантових комп'ютерів[Електронний ресурс] : конспект лекцій / І. О. Азнаурян. – Київ : КНУБА, 2025. – 131 с.

Містить теоретичний матеріал з курсу «Фізичні основи квантових комп'ютерів».

Призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальностями 123 «Комп'ютерна інженерія», 125 «Кібербезпека та захист інформації», для здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти за спеціальністю 015.10 «Професійна освіта. Комп'ютерні технології».

УДК 53(075)

© І. О. Азнаурян, 2025

© КНУБА, 2025

# Передмова

Вивчення явищ у мікросвіті, визначення законів руху елементарних частинок, атомних ядер, атомів, молекул та їх об'єднань – це завдання **квантової механіки!**

Квантова механіка також вирішила питання будови атомів і атомних ядер, природи хімічного зв'язку, пояснила принципи заповнення періодичної системи елементів; закони квантової механіки стали основою для вивчення і макроскопічних тіл – металів, діелектриків, напівпровідників,



**1858 – 1947**


квантових рідин, тощо як системи взаємодіючих частинок. Надпровідність, надплинність, феромагнетизм це явища, природу яких змогли пояснити лише після застосування законів квантової механіки. Вивчення на молекулярному рівні явищ у біології, складу та еволюції Всесвіту не може обійтись без квантово-механічного опису фізичних процесів, які там присутні.

В теперішній час теорія квантових комп'ютерів, квантова криптографія, експериментально реалізоване явище квантової телепортації базуються на симбіозі математики і квантової фізики. Отже, сучасний рівень розвитку людського пізнання значною мірою базується на законах квантової механіки, що впливає на наше розуміння властивостей, будови, перетворень у природі.

14 грудня 1900 вважається датою створення квантової механіки. В цей день на засіданні німецького фізичного товариства професор теоретичної фізики Берлінського університету **Макс Планк** зробив доповідь щодо формули для спектральної густини енергії випромінювання абсолютно чорного тіла, яку “створив”, інтерполюючи експериментальні дані та базуючись на деяких теоретичних міркуваннях.

Перш ніж розібратися з доведенням М. Планка своєї формули, згадаємо важливі віхи, зроблені до Планка, у проблемах рівноважного електромагнітного випромінювання тіла, нагрітого до температури  $T$ .

# Вступ



Курс «Фізичні основи квантових комп'ютерів» є фундаментальною складовою підготовки майбутніх фахівців у сфері комп'ютерної інженерії, кібербезпеки та професійної освіти з комп'ютерних технологій, надаючи необхідні знання для розуміння основ квантових обчислень та їх застосування у майбутніх технологіях. Дисципліна «Фізичні основи квантових комп'ютерів» є вибірковою компонентою циклу загальної підготовки бакалаврів в галузі знань 12 «Інформаційні технології» та магістрів в галузі знань 01 «Освіта/Педагогіка».

## **Роль та значення дисциплін**

Цей курс має на меті сформувати у студентів глибоке розуміння фізичних принципів, що лежать в основі квантових комп'ютерів. Опанування дисципліни дозволить здобувачам вищої освіти засвоїти ключові концепції квантової механіки, необхідні для аналізу та розробки алгоритмів квантових обчислень, а також оцінити їх потенціал у сфері інформаційних технологій та кібербезпеки.

Значення курсу є особливо важливим для фахівців із кібербезпеки, оскільки розвиток квантових комп'ютерів ставить нові виклики перед існуючими криптографічними методами. Також курс є корисним для студентів, що спеціалізуються на комп'ютерній інженерії, оскільки квантові процесори стають дедалі доступнішими та потребують спеціальних методів програмування та інтеграції у сучасні обчислювальні системи.

## **Місце дисципліни серед інших курсів**

Курс «Фізичні основи квантових комп'ютерів» є міждисциплінарним та базується на знаннях, отриманих студентами з таких дисциплін, як:

- **Фізика** (зокрема квантова механіка, електродинаміка);
- **Математика** (лінійна алгебра, теорія ймовірностей, комплексний аналіз);
- **Алгоритми та структури даних** (аналіз класичних та квантових алгоритмів);
- **Криптографія та безпека інформації** (аналіз квантових загроз для класичних криптографічних протоколів).

Таким чином, курс синтезує знання з природничих та інженерних наук для формування новітніх компетенцій у сфері квантових обчислень.

## Основні завдання курсу

У процесі вивчення дисципліни перед студентами стоять такі завдання:

1. Ознайомитися з основними фізичними принципами квантової механіки, що застосовуються в квантових обчисленнях.
2. Дослідити основні елементи квантових обчислювальних систем (кубіти, квантові схеми).
3. Оцінити потенціал квантових обчислень у сфері криптографії, моделювання складних систем та оптимізаційних задач.

## Очікувані результати навчання

Після успішного засвоєння курсу студенти повинні:

- **Знати** основні положення квантової механіки, що застосовуються у квантових обчисленнях; принципи роботи квантових алгоритмів та їх відмінність від класичних; основи квантової криптографії та перспективи її застосування.
- **Вміти** аналізувати та будувати квантові схеми, програмувати квантові алгоритми на мовах Qiskit або Cirq, оцінювати безпеку криптографічних систем у контексті квантових атак.
- **Володіти навичками** роботи з квантовими симуляторами та реальними квантовими пристроями, а також інтеграції квантових алгоритмів у класичні обчислювальні процеси.

Прилади, які використовуються спеціалістами в галузі знань «Інформаційні технології» у своїй діяльності, є результатом упровадження фізичних законів у практики. Вивчаючи ВК «ФОКК», студенти знайомляться з основними законами, явищами та поняттями квантової механіки та їхнім застосуванням у створенні теорії квантових комп'ютерів, а також із основними принципами квантової криптографії. Можуть самостійно вирішувати завдання з цих областей. Вони також знають елементарні прийоми експериментальної наукової роботи та основні методи розрахунку та можуть їх застосовувати. Здатні аналізувати (вимірювати) дані, адекватно їх відображати графічно та критично обговорювати. На лабораторному практикумі студенти формують розуміння фізичних взаємозв'язків і здатні перевірити теоретичні концепції в експериментах. Вони знайомляться простими методами аналізу даних і можуть сформулювати та документувати процес наукової роботи та критично

обговорювати його результати. Студенти навчаються працювати в команді та науково спілкуватися один з одним.

Курс «Фізичні основи квантових комп'ютерів» забезпечує студентів необхідними знаннями та навичками, що є актуальними для розвитку сучасних технологій у сфері комп'ютерної інженерії та кібербезпеки.

У конспекті лекцій використалась значна кількість матеріалу з літературних джерел, що може пояснювати співпадіння з ними. Це пов'язано з кількома факторами:

1. Фізика – це наука, в якій фундаментальні закони, визначення та рівняння є загальноприйнятими та не можуть бути значно змінені при переказі. Відповідно, багато формулювань залишаються стандартними.
2. При викладанні матеріалу, зрозуміло, була орієнтація на класичні підручники та наукові статті, щоб забезпечити точність і відповідність програмі, що призводить до подібності з першоджерелами.
3. Використання усталених формулювань дозволяє студентам легше співвідносити матеріал із підручниками та іншими ресурсами, що сприяє їх кращому розумінню.
4. У випадках, коли це необхідно, матеріал адаптований до зручної форми для студентів.

# ІСТОРИЧНІ ЗАСАДИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ

## Лекція 1

### Теплове випромінювання. Кількісні закономірності випромінювання чорного тіла. Теорія М. Планка та її підтвердження (заряд електрона, фотоефект, теплоємність)

#### 1.1. Теплове випромінювання

*Теплове електромагнітне випромінювання* є наслідком хаотичного теплового руху частинок середовища. Зручною теоретичною моделлю є так зване “абсолютно чорне тіло”, тобто таке, що повністю поглинає падаючу електромагнітну енергію і знаходиться в *термодинамічній рівновазі* з електромагнітним полем. Моделлю такої рівноважної системи може бути замкнена порожнина (рис. 1.1), оточена тепловим резервуаром при температурі  $T$ .

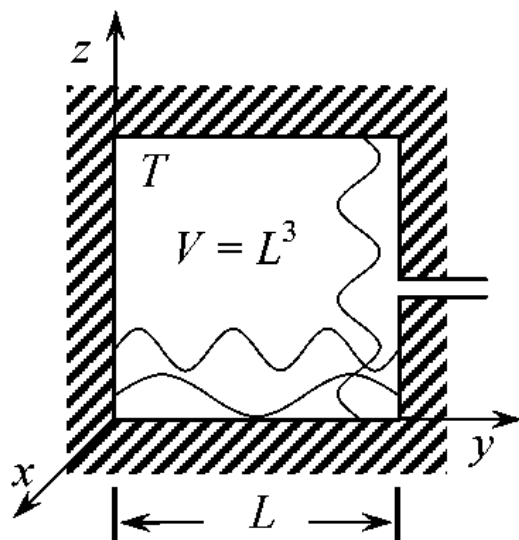


Рис. 1.1

Спостерігати випромінювання можна через отвір, достатньо невеликий, щоб втратою енергії через нього можна було знехтувати (рис. 1.1).

Зовнішнє випромінювання, що падає на отвір, проходить всередину і там залишається, тобто повністю поглинається. Отже, такий отвір є моделлю *абсолютно чорного тіла*.

Густав Кірхгоф (1824–1887) вивів закони, названі його іменем, і показав, що енергія  $E$  рівноважного випромінювання абсолютно

чорного тіла є універсальною функцією температури  $T$ . Йозеф Стефан (1835–1893) емпірично, а Людвіг Больцман теоретично довели, що енергія на одиницю об’єму пропорційна четвертому степеню температури.

Нехай спектральна густина енергії рівноважного електромагнітного поля теплового випромінювання при температурі  $T$  дорівнює:

$$u_\nu(T) = \frac{du(T)}{d\nu}, \quad (1.1)$$

де  $u_\nu(T)$  – густина енергії поля (енергія на одиницю об'єму),  $\nu$  – частота.

Тоді, вочевидь, зібрана з усіх частот повна густина енергії поля в об'ємі  $V$  становить:

$$\frac{E}{V} = \int_0^\infty u_\nu(T) d\nu, \quad (1.2)$$

Саме її і потрібно було знайти.

Згідно з Кірхгофом  $u_\nu(T)$  є універсальною функцією, що не залежить від природи випромінювача, в тій мірі що він є “абсолютно чорним”. Проте знайти цю функцію Кірхгофу не вдалось.

### 1.1.1. Закон Релея – Джинса

В тепловій рівновазі, в порожнині на рисунку 1.1 встановлюються нормальні коливання електромагнітного поля (нормальні моди), що є *стоячими хвилями*. Для стоячої хвилі на довжині  $L$  має вклатись ціле число півхвиль:

$$k_i = n_i \frac{\pi}{L}, n_i = 0, 1, 2, \dots, i = x, y, z, \quad (1.3)$$

де  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  – аналог хвильового вектора для стоячої хвилі (стояча хвиля не має справжнього хвильового вектора).

У  $\vec{k}$ -просторі (рис. 1.2), кожній стоячій хвилі (моди коливань) відповідає точка з координатами  $(k_x, k_y, k_z)$ . Ці точки утворюють кубічну ґратку з періодом  $\pi/L$  (рис. 1.2).

Тоді кількість усіх стоячих хвиль в інтервалі хвильових чисел від 0 до  $k$  дорівнює кількості точок

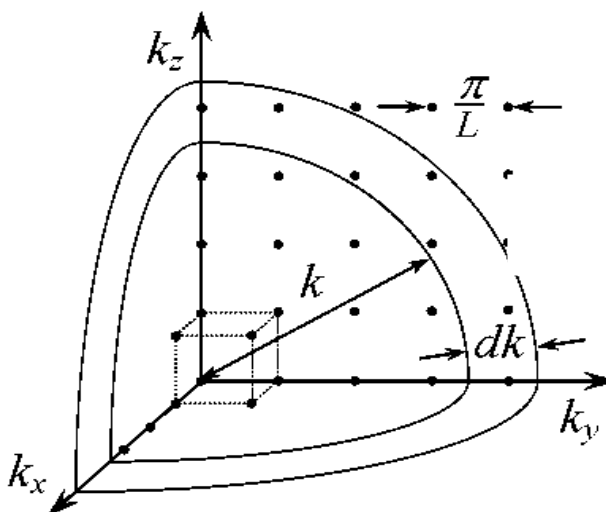


Рис. 1.2

гратки в  $1/8$  кулі з радіусом  $k$  (фактор  $1/8$  виникає через те, що для стоячої хвилі  $k_x, k_y, k_z$ , мають бути додатними). Кожній точці відповідає об'єм комірки  $(\pi/L)^3$ , так що слід поділити  $1/8$  об'єму кулі з радіусом  $k$  на об'єм комірки. Оскільки кожна хвиля може мати дві ортогональні поляризації, що відповідають різним модам, то для визначення кількості мод отримане число слід ще помножити на 2.

Отже, кількість мод  $N$  в  $\vec{k}$ -об'ємі  $(1/8) \cdot (4/3\pi k^3)$  становить:

$$N = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4/3\pi k^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3} \frac{k^3 L^3}{\pi^2}.$$

Виражаючи  $k$  через частоту моди  $\nu$  та швидкість світла  $c$ ,  $k = (2\pi\nu)/c$ , отримуємо:

$$N = \frac{8\pi}{3} \cdot \frac{\nu^3 L^3}{c^3}.$$

Тоді кількість мод на одиницю частоти і об'єму  $V = L^3$ :

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3},$$

а спектральна густина енергії випромінювання:

$$u_\nu(T) = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN}{d\nu} \langle E \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E \rangle,$$

де  $\langle E \rangle$  - середня енергія на одну моду.

Оскільки моди є гармонічними осциляторами, то в тепловій рівновазі має бути  $\langle E \rangle = k_B T$  на один осцилятор, отже:

$$u_\nu(T) = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN}{d\nu} \cdot k_B T = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T. \quad (1.4)$$

Вираз (1.4) є формулою Релея – Джинса.

Повна енергія випромінювання в одиничному об'ємі дорівнює інтегралу від  $u_\nu(T)$  за всіма частотами. Але інтеграл  $\int_0^\infty u_\nu(T) \cdot d\nu = \infty$  розходиться при великих частотах (рис. 1.3)! Це і є **ультрафіолетова катастрофа**.

**Макс Планк** вирішив проблему в 1900 р., запропонувавши гіпотезу,

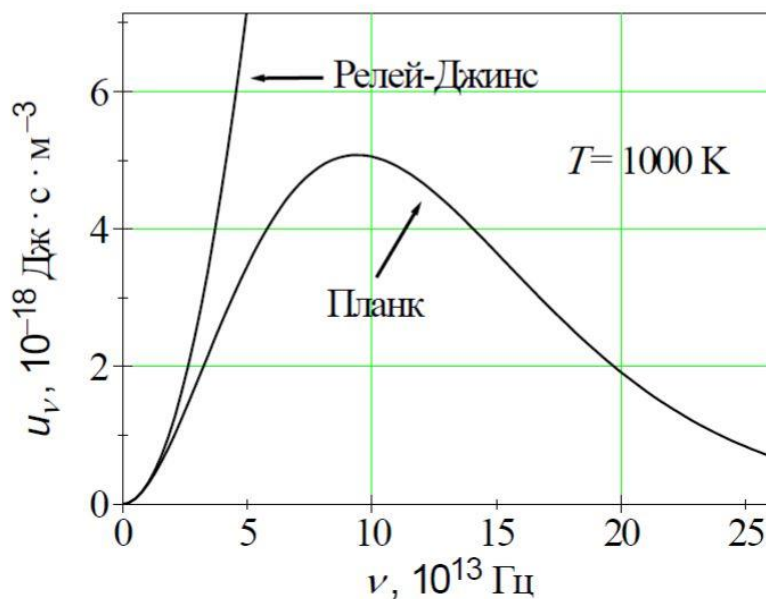


Рис. 1.3

що електромагнітна енергія має випромінюватися порціями, квантами:

$$E = h\nu, \quad (1.5)$$

де  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ , число назване на честь М. Планка – сталою Планка.

З урахуванням гіпотези про квант випромінювання, закон теплового випромінювання Планка:

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (1.6)$$

Планк отримав цей результат на основі глибоких термодинамічних міркувань (детальний опис дає Вакарчук в підручнику [1]), і дійшов до висновку про квантування енергії лише в кінці, проте особливого значення цьому не надав.

На рисунку 1.3 графічно порівнюються закони Релея - Джинса та Планка.

Вільгельм Він, німецький фізик, за допомогою оригінального *уявного експерименту* з дослідження зміни спектра випромінювання, яке відбивається від рухомого дзеркала, завдяки ефекту Допплера, показав (1893), що спектральна густина енергії, поділена на  $\nu^3$ , є функцією відношення  $\nu/T$ .

Цей так званий закон зміщення Віна є точним. Назва закону обумовлена тим, що функція  $u_\nu(T)$  має максимум у деякій точці  $\nu/T = \text{const}$  (рис. 1.3) та із збільшенням температури він зміщується на частотній шкалі до більших значень  $\nu$  або до менших довжин хвиль  $\lambda$  (рис. 1.4).

### 1.1.2. Закони Віна

Пізніше, 1896 р., на основі молекулярно кінетичної теорії В. Він з “напівсерйозних” міркувань запропонував явний *вигляд спектральної густини енергії теплового випромінювання* (у 1911 році був нагороджений Нобелівською премією за дослідження явищ випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль абсолютно чорним тілом):

$$u_\nu(T) = \text{const} \cdot \nu^3 e^{-\frac{a\nu}{T}}, \quad (1.7)$$

де  $a$  – універсальна стала.

М. Планк почав свої дослідження цієї проблеми з моделювання випромінювання абсолютно чорного тіла сукупністю гармонічних осциляторів і показав, що:

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} U, \quad (1.8)$$

де  $U$  – середня енергія окремого осцилятора.

З (1.8) та з формули Віна (1.7)) випливає, що середня енергія окремого осцилятора:

$$U = h\nu e^{-\frac{a\nu}{T}}, \quad (1.9)$$

де  $h$  – друга універсальна стала.

## 1.2. Закони М. Планка

Макс Планк увів гіпотезу про *електромагнітну ентропію*: оскільки поле випромінювання є накладанням коливань з різними нерегулярно змінними (випадковими) фазами, то можна говорити про певний безлад, а отже, про ентропію й температуру.

Застосуємо перший принцип термодинаміки до системи лінійних гармонічних осциляторів, які моделюють електромагнітне поле:

$$dU = TdS - pdV, \quad (1.10)$$

де  $U$  – середня енергія одного осцилятора;  $T$  – температура в енергетичних одиницях (перехід до шкали Кельвіна здійснюється заміною  $T$  на  $k_B T$ ,  $k_B$  – стала Больцмана);  $S$  – ентропія з розрахунку на один осцилятор;  $p$  – тиск;  $V$  – об’єм, у якому локалізоване поле.

Нехай  $V = \text{const}$ , тоді:

$$\frac{dS}{dU} = \frac{1}{T}. \quad (1.11)$$

З формули для середньої енергії осцилятора (1.9) знаходимо:

$$\ln \frac{U}{h\nu} = -\frac{a\nu}{T}. \quad (1.12)$$

Тоді перша похідна від ентропії (1.11) з урахуванням (1.12) буде:

$$\frac{dS}{dU} = -\frac{1}{a\nu} \ln \frac{U}{h\nu}. \quad (1.13)$$

Друга похідна від (1.13) за енергією має достатньо простий вигляд:

$$\frac{d^2S}{dU^2} = -\frac{1}{a\nu U}. \quad (1.14)$$

М. Планк звернув увагу, що обернена величина  $(-1/a\nu U)$  має прозорий фізичний зміст: вона дорівнює теплоємності, помноженій на квадрат температури. Саме тому М. Планк працював із другою похідною від ентропії. М. Планк узагалі любив “ентропійну мову”. Він досліджував ентропію як термодинамічну функцію і у своїй докторській дисертації (ефект від якої, за його ж словами, дорівнював нулеві, скоріш за все тому, що поняття ентропії було новим і не дуже зрозумілим). Однак виявилось, що саме завдяки поняттю ентропії відкриття точної формули для спектральної густини енергії абсолютно чорного тіла стало найпростішим.

Спочатку Планк вважав, що формула В. Віна для спектральної густини енергії є точною. Точним він уважав і вираз для ентропії, яку знайшов, інтегруючи рівняння (1.13) для першої похідної від ентропії за енергією:

$$S = -\frac{U}{a\nu} \ln \frac{U}{eh\nu}, \quad (1.15)$$

де  $e$  – основа натуральних логарифмів.

Згодом Отто Люммер (1860-1925) і Ернст Прінгсгайм (1859-1917) у 1899 році представили результати вимірювань у ділянці великих довжин хвиль ( $\nu \rightarrow 0$ ), які суперечили формулі В. Віна для густини енергії теплового випромінювання (1.7). Таким чином виявилось, що формула Віна працює лише в ділянці великих частот, і детальна експериментальна перевірка цього факту набула принципового значення для розуміння природи теплового випромінювання.

У п'ятницю 19 жовтня 1900 р. на засіданні Німецького фізичного товариства Ф. Курльбаум повідомив про результати вимірювання енергії випромінювання на ділянці дуже великих довжин хвиль, які він виконав разом з Г. Рубенсом, який був близьким товаришем М. Планка та високо цінував свою співпрацю з ним. Ці експериментальні результати заперечили справедливість формули Віна, виявилось, що  $u_\nu(T) \sim T$  при  $\nu \rightarrow 0$ .

Після повідомлення Ф. Курльбаума на цьому ж засіданні виступив М. Планк, який, використавши ці експериментальні результати (зі спогадів Планка: *тому що мені цей результат став відомим завдяки усному повідомленню авторів уже за декілька днів до засідання, то я мав час ще перед засіданням використати їхні висновки в моєму методі та обчислити ентропію*), запропонував свою формулу для спектральної густини енергії теплового випромінювання абсолютно чорного тіла.

Отже, як впливає із зв'язку середньої енергії одного осцилятора при низьких частотах та формули Планка (1.8), маємо:

$$U = CT, \quad (1.16)$$

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} CT, \quad (1.17)$$

де  $C$  – стала величина.

Вираз (1.17) відомий як **закон Релея - Джинса**.

Цей точний у межах класичної фізики вираз для  $u_\nu(T)$  при великих частотах зростає як  $\nu^2$  (усупереч здоровому глузду), і як наслідок, повна енергія  $E$  розбігається (“ультрафіолетова катастрофа”, рис. 1.3), що ілюструє принципову неспроможність класичної теорії пояснити закони рівноважного випромінювання.

Тепер з першого закону термодинаміки (1.11) та (1.16):

$$\frac{dS}{dU} = \frac{C}{U}, \quad (1.18)$$

тоді друга похідна:

$$\frac{d^2S}{dU^2} = -\frac{C}{U^2}. \quad (1.19)$$

Знайдені два вирази для другої похідної від ентропії за енергією (1.14) та (1.19), які справедливі в границі високих та низьких частот, М. Планк вирішив об'єднати однією простою інтерполяційною формулою:

$$\left(\frac{d^2 S}{dU^2}\right)^{-1} = -avU - \frac{U^2}{C}. \quad (1.20)$$

Справді, для  $\nu \rightarrow 0$  домінуючим є другий доданок у правій частині цього рівняння, і ми отримуємо формулу (1.19), а для великих частот другий доданок стає несуттєвим, і ми повертаємось до формули, яку дає закон В. Віна (1.14). Інтерполяційна формула (1.20), яку запропонував Планк, перше, що приходить до голови. Це і був той евристичний момент у міркуваннях Планка, який привів до глибоких перетворень у науці, що принесла з собою квантова фізика. Воістину все геніальне - просте. Дивує те, що Планк працював саме з другою похідною, для якої граничні випадки мають дуже простий вигляд. Це й дало змогу їх об'єднати.

Перетворим вираз для другої похідної (1.20) таким чином:

$$\frac{d^2 S}{dU^2} = -\frac{1}{av} \left( \frac{1}{U} - \frac{1}{U + avC} \right).$$

Інтегруванням, отримуємо:

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{av} \ln \left( \frac{U + avC}{U} \right) + \text{const}. \quad (1.21)$$

Оскільки при  $T \rightarrow \infty$ ,  $U \rightarrow \infty$ , то  $\text{const} = 0$ , маємо:

$$U = \frac{h\nu}{e^{\frac{av}{T}} - 1}. \quad (1.22)$$

В (1.22) ураховано, що при великих частотах цей вираз повинен переходити у формулу, яку отримуємо із закону Віна (1.14), і тому  $C = h/a$ .

Остаточно одержуємо знамениту **формулу Планка для спектральної густини енергії**:

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{av}{T}} - 1}. \quad (1.23)$$

На доповіді 19 жовтня 1900 року М. Планк зазначив: “Ця формула, наскільки я знаю, відповідає експериментальним даним, які опубліковані дотепер... Тому я вважаю за можливе звернути Вашу увагу на наведену нову

формулу, яка, як на мене, є найпростішою (окрім формули Віна), з погляду електромагнітної теорії випромінювання.” Це була інтерполяційна формула, одна з багатьох існуючих на той час і одна з найпростіших, що добре описувала експериментальну залежність спектральної густини енергії випромінювання абсолютно чорного тіла від частоти, яку М. Планк навів у своїй доповіді Німецькому фізичному товариству.

### 1.2.1. Гіпотеза М. Планка

Макс Планк настільки повірив у свою формулу, що вирішив довести її з мікроскопічних міркувань. Працюючи протягом майже двох місяців, він, скориставшись ідеєю Л. Больцмана про пропорційність ентропії  $S$  до логарифма від кількості станів, однозначно показав, що для її теоретичного обґрунтування необхідно припустити, що *світло поглинається й випромінюється дискретними порціями – квантами, енергія яких пропорційна до частоти випромінювання*. Він знову пішов “ентропійною дорогою” і вирішив винайти з мікроскопічних міркувань вираз для ентропії, що отримується з його *інтерполяційної формули*, простим інтегруванням за енергією  $U$ :

$$S = \frac{h}{a} \left[ \left( 1 + \frac{U}{h\nu} \right) \ln \left( 1 + \frac{U}{h\nu} \right) - \frac{U}{h\nu} \ln \frac{U}{h\nu} \right]. \quad (1.24)$$

Відомо, що за Л. Больцманом, повна ентропія  $S$  дорівнює  $\ln \Omega$ , де  $\Omega$  – кількість різних можливих мікроскопічних станів термодинамічної системи:

$$S = k_B \ln \Omega. \quad (1.25)$$

Записавши наближену формулу для ентропії із закону В. Віна:

$$S = -\frac{h}{a} \ln \left( \frac{U}{eh\nu} \right)^{U/h\nu}, \quad (1.26)$$

можна побачити, що вона є подібною до формули шотландського математика Джеймса Стірлінга (1692-1770) для логарифма від факторіала деякого числа  $N$ :

$$\ln N! = \ln \left( \frac{N}{e} \right)^N, \quad N \gg 1. \quad (1.27)$$

Врешті решт ці аналогії навели М. Планка на думку “представити з факторіалів” величину  $\Omega$  так, щоб отримати точний вираз для ентропії, що й привело його до ідеї дискретності енергії електромагнітного випромінювання. Це стало темою доповіді, яку зробив М. Планк у

п'ятницю 14 грудня 1900 року на засіданні Німецького фізичного товариства.

Отже, нехай повна енергія  $N$  осциляторів, що моделюють поле, дорівнює  $NU$ , а повна ентропія з:

$$NS = \ln \Omega \quad (1.28)$$

Опустимо з цього виразу сталу Больцмана  $k_B$  перед логарифмом, згідно із застосуванням температури в енергетичних одиницях, яку фактично вперше й увів М. Планк цим співвідношенням. Далі, за М. Планком: «повну енергію  $NU$  потрібно уявляти собі не у вигляді неперервної величини, а у вигляді дискретної, що складається з цілого числа рівних частин:

$$NU = \eta \varepsilon, \quad (1.29)$$

$\eta$  – ціле, взагалі кажучи, велике число;  $\varepsilon$  потрібно визначити».

Таким чином, величина  $\Omega$  – це кількість різних способів розподілу  $\eta$ -елементів за  $N$  осциляторами.

Як модель можна розглянути  $\eta$  кульок в  $N$  скриньках і підрахувати кількість різних способів їхнього розподілу, тобто кількість різних перестановок між собою  $\eta$  кульок і  $(N - 1)$ -ї стінок, що розділяють ці скриньки.

Усіх перестановок є  $[(N - 1) + \eta]!$ , однак  $\eta!$  перестановок  $\eta$  кульок у скриньці, як і  $(N - 1)!$  перестановок стінок між скриньками, нічого нового не дають, тому кількість різних перестановок:

$$\Omega = \frac{[(N - 1) + \eta]!}{(N - 1)! \eta!}. \quad (1.30)$$

Використовуючи формулу Стірлінга (1.27) для факторіалів у цьому виразі, коли  $N \gg 1, \eta \gg 1$ , можна знайти:

$$\ln \Omega = (N + \eta) \ln(N + \eta) - N \ln N - \eta \ln \eta,$$

та з повної енергії (1.29) за М. Планком:

$$\frac{\eta}{N} = \frac{U}{\varepsilon},$$

ентропія на один осцилятор буде:

$$S = \left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) - \frac{U}{\varepsilon} \ln \frac{U}{\varepsilon}. \quad (1.31)$$

Зіставимо формулу ентропії на один осцилятор (1.31) з інтерполяційною формулою для ентропії, запропоновану М. Планком (1.24) і одержимо, що:

$$a = h,$$

Тоді як *елемент (квант) енергії електромагнітного випромінювання:*

$$\boxed{\varepsilon = h\nu.} \quad (1.32)$$

А це і є *знаменита формула (гіпотеза) М. Планка!*

Якщо скористатись виразом циклічної частоти  $\omega = 2\pi\nu$  та сталою Планка  $\hbar = h/2\pi$  – однією з універсальних фундаментальних фізичних констант (таких як швидкість світла  $c$ , гравітаційна стала  $G$ , заряд електрона  $e$ ), що має розмірність дії (Дж·с) і є *елементарним квантом дії*, то квант енергії:

$$\boxed{\varepsilon = \hbar\omega.} \quad (1.33)$$

М. Планк за відкриття кванта дії став у 1918 році лауреатом Нобелівської премії.

Остаточно, для *спектральної густини енергії випромінювання абсолютно чорного тіла маємо:*

$$\boxed{u_{\omega}(T) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^3 \frac{\hbar}{\pi^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1}.} \quad (1.34)$$

Повну енергію поля на одиницю об'єму одержуємо звідси інтегруванням за всіма частотами, що призводить до закону Стефана – Больцмана.

Як видно, шлях М. Планка до його відкриття складається і з геніальних здогадок, і з вимушених кроків. Такий вибір ентропійного підходу до вирішення проблеми абсолютно чорного тіла, далі використання саме другої похідної від ентропії, яка виявилась дуже простою на вигляд, щаслива здогадка її інтерполяції з використанням формули Віна та експериментальних вимірів при низьких частотах, сміливість у використанні формули Больцмана для ентропії з геніальною здогадкою “факторіального” моделювання кількості станів і вже справді вимушені кроки до дискретності енергії електромагнітного випромінювання – *такий шлях Макса Планка до свого фундаментального відкриття елементарного кванта дії.*

### 1.3. Підтвердження теорії М. Планка

Нова теорія вимагала підтверджень.

Виходячи зі своєї формули і використовуючи експериментальні дані про теплове випромінювання, М. Планк *знайшов* з високою на той час точністю до 4% *величину елементарного заряду*:

- визначивши з експериментальних вимірювань стали Больцмана  $k_B$ ,
- з газової сталої  $R = k_B N_A$  – число Авогадро  $N_A$
- з числа Фарадея  $F = e N_A$  – величину елементарного заряду  $e$ .

Гіпотеза квантів уже давала перші результати.

#### 1.3.1. Фотоефект.

У 1905 році А. Айнштайн, який працював тоді експертом у патентному бюро в Берні, використав гіпотезу Планка для пояснення фотоефекту. Явище фотоефекту відкрив (випадково) німецький фізик Г. Герц у 1887 році. Перші дослідження цього явища виконав російський фізик О. Г. Столетов у 1888 році, а згодом – німецький фізик Ф. Ленард (1899р.). А. Айнштайн чітко вказав на те, що квантування енергії світла відбувається не тільки в актах поглинання та випромінювання світла чорним тілом, а й що квантові властивості притаманні світлу як такому.

Отже, фактично було введено поняття фотона як кванта електромагнітного поля, хоча сама назва “фотон” виникла значно пізніше, її ввів у 1926 році американський фізик-хімік Г. Н. Льюїс.

Формула Айнштейна для фотоефекту:

$$\hbar\omega = A_{\text{вих}} + \frac{mv^2}{2}. \quad (1.35)$$

У 1921 році А. Айнштайн був нагороджений Нобелівською премією за важливі фізико-математичні дослідження, особливо за відкриття законів фотоелектричного ефекту.

Американський фізик Роберт Ендрюс Міллікен (1868-1953) у 1912 ретельно перевіряв формулу А. Айнштейна для фотоефекту та за дослідження в галузі фізики елементарних зарядів і фотоелектричного ефекту йому була присуджена в 1923 році Нобелівська премія.

#### 1.3.2. Теплоємність речовин та закон Дебая

У 1907 році А. Айнштайн застосував гіпотезу квантів до опису коливань атомів твердого тіла і пояснення низькотемпературної поведінки

теплоємності. Уважаючи, що всі  $N$  атомів коливаються з частотою  $\omega_0$ , для повної енергії тіла з урахуванням  $(3N-6)$  коливальних ступенів вільності:

$$E = (3N - 6) \frac{\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/T} - 1}, \quad (1.36)$$

а теплоємність:

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = (3N - 6) \left( \frac{\hbar\omega_0}{T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_0/T}}{(e^{\hbar\omega_0/T} - 1)^2}. \quad (1.37)$$

При низьких температурах за  $T \rightarrow 0$ , відповідно до спостережень, теплоємність  $C_V \rightarrow 0$ . Однак, згідно з дослідом, прямування теплоємності до нуля є степеневим.

Недолік цієї теорії виправили пізніше, у 1912 році, П. Дебай а також М. Борн і Т. Карман, розглядаючи, на відміну від Айнштейна, коливання атомів як систему зв'язаних осциляторів із частотами  $\omega_\gamma$ , розподіленими від нульового значення до деякого максимального:

$$E = \sum_{\gamma=1}^{3N-6} \frac{\hbar\omega_\gamma}{e^{\hbar\omega_\gamma/T} - 1}, \quad (1.38)$$

або:

$$E = \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} d\omega, \quad (1.39)$$

де  $\rho(\omega) = 9(N-2)\omega^2 / \omega_D^3$  – густина станів, відмінна від нуля для частот  $0 \leq \omega \leq \omega_D$ , а гранична частота Дебая  $\omega_D$  є фізичним параметром речовини.

Теплоємність за низьких температур прямує до нуля за законом «кубів»,  $C_V \propto T^3$ , що узгоджується з дослідом (рис. 1.5):

$$C_V(T) = \frac{12\pi^4}{5} Nnk_B \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3, \quad (1.40)$$

де  $N$  – кількість елементарних комірок;  $n$  – кількість атомів в одній комірці;  $k_B$  – стала Больцмана.

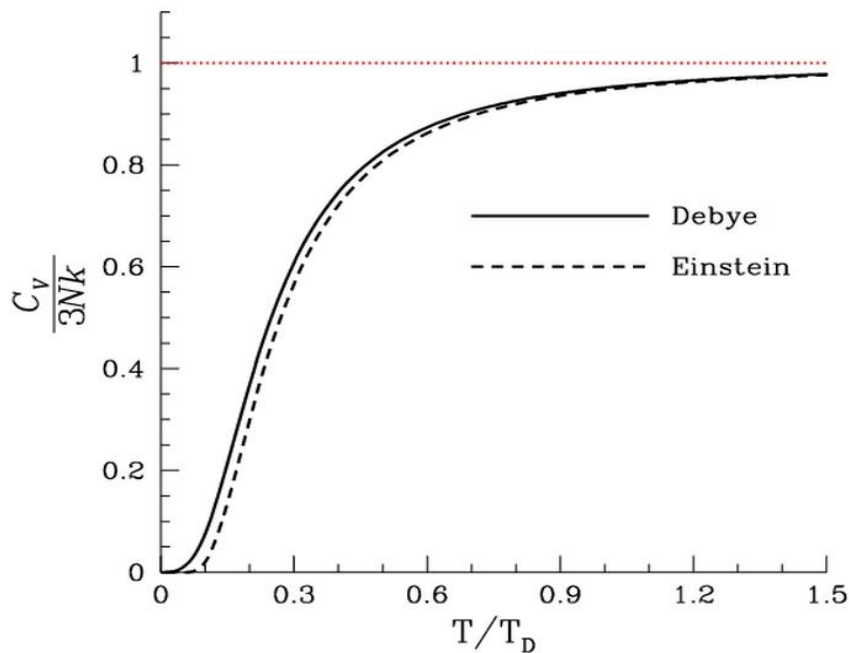


Рис. 1.5

## Контрольні запитання до лекції 1

1. Що таке теплове випромінювання, і які його основні характеристики?
2. Дайте визначення чорного тіла. Які основні властивості випромінювання чорного тіла?
3. Сформулюйте закон Стефана-Больцмана та поясніть його фізичний зміст.
4. Запишіть закон зміщення Віна і поясніть його значення для випромінювання чорного тіла.
5. У чому полягала проблема ультрафіолетової катастрофи в класичній фізиці?
6. Запишіть та поясніть основне рівняння Планка для спектральної густини енергії випромінювання чорного тіла.
7. Як гіпотеза квантування енергії Планка змінила уявлення про природу випромінювання?
8. Як експериментально було підтверджено теорію Планка за допомогою фотоефекту?
9. Як вимірювання заряду електрона підтвердило квантову природу електромагнітного випромінювання?
10. Яким чином квантова теорія пояснює залежність теплоємності тіл від температури?

# ІСТОРИЧНІ ЗАСАДИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ

## Лекція 2

### Атомні спектри. Борівська модель атома гідрогену. Момент кількості руху. Хвилі матерії. Дифракція частинок. Хвильова функція



#### 2.1. Атомні спектри. Борівська модель атома гідрогену. Момент кількості руху

Так склалося, що в роки становлення квантової теорії випромінювання були зроблені не менш революційні відкриття і в царині мікроскопічної будови речовини. Відкриття електрона (Дж. Дж. Томсон, 1898 р.) та атомного ядра (Ернест Резерфорд, 1913 р.) незаперечно довели, що атом не є неподільним (а саме так перекладається грецьке «атомос») і складається з малого масивного ( $\sim 10^{-4}$  розмірів і 99,95% маси атома) позитивно зарядженого ядра та відповідної кількості легких негативно заряджених електронів, які рухаються навколо ядра під дією кулонівської сили притягання. Ядерна модель атома нагадує сонячну систему, в якій «маленькі і легенькі» планети рухаються по орбітах навколо масивного «ядра» Сонця під дією сили гравітаційного притягання.

Але, попри позірну схожість, атом принципово відрізняється від планетарної системи тим, що «планети» *електрони мають електричний заряд*. Тому за законами класичної електродинаміки через наявність доцентрового прискорення електрони при обертанні навколо ядра мали би неперервно випускати електромагнітне випромінювання з частотою рівною частоті обертання. При цьому вони через утрату енергії мали би поступово наближатися до ядра і врешті решт упасти на нього, утворивши нейтральну частинку із розмірами ядра. Причому, за розрахунками такий колапс мав би статися практично миттєво [2]. Крім того через неперервне збільшення частоти обертання електронів при наближенні до ядра в спектрі випромінювання атомів мала би спостерігатися широка неперервна смуга частот.

В дійсності немає нічого схожого. Атоми є стабільними і без зовнішнього впливу необмежено довго зберігають свої індивідуальні властивості. Виняток становлять тільки радіоактивні елементи. Але спонтанна зміна атомів цих елементів зумовлена не падінням електронів на ядро, а процесами в самому ядрі. Спектри випромінювання атомів теж не є неперервними: вони містять індивідуальні для кожного хімічного елемента дискретні частоти.

У 1913 році Нільс Бор (1885-1962), який тоді працював у Манчестерському університеті у Е. Резерфорда (1871-1937), *застосував квантову гіпотезу* до моделі атома Е. Резерфорда й побудував квантову теорію атома, сформулювавши свої постулати:

**I. Атом може перебувати тільки в деяких стаціонарних («квантових») станах, енергії яких утворюють дискретний набір  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . У стаціонарних станах електрони атома не випромінюють енергію.**

**II. Перехід атома із стаціонарного стану з енергією  $E_{n'}$  в інший з меншою енергією  $E_n$ , відбувається стрибком і супроводжується випромінюванням одного кванта світла з енергією, згідно з законом збереження енергії:**

$$\boxed{h\nu \equiv \hbar\omega_{n'n} = E_{n'} - E_n.} \quad (2.1)$$

Обидва постулати Бора суперечать законам класичної фізики, декларуючи, по-перше, що попри наявність прискорення, електрон в стаціонарному стані атома не випускає електромагнітного випромінювання і, по-друге, що частота випромінювання атома не має безпосереднього відношення до частоти обертання електрона навколо ядра.

На основі вказаних постулатів і законів класичної механіки Бор *розрахував розміри найпростішого з атомів атома гідрогену та частоти в його спектрі випромінювання* і отримав блискучий збіг теоретичних результатів з експериментальними даними.

Рівні енергії атома  $E_n$  визначаються:

1. з класичних рівнянь для повної енергії:

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2a}; \quad (2.2)$$

2. з третього закону Кеплера:

$$\omega^2 a^3 = \frac{Ze^2}{m}; \quad (2.3)$$

3. з умов квантування, згідно з гіпотезою М. Планка (1.33):

$$|E| = \frac{\hbar\omega}{2}n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

де  $Ze$  – заряд ядра;  $\omega$  – частота обертання електрона навколо ядра;  $a$  – велика піввісь еліптичної орбіти;  $m$  – маса електрона.

Зазначимо, що Н. Бор для узгодження своєї теорії з дослідними вимірюваннями змушений був в умовах квантування для повної енергії поставити половинну частоту  $\omega/2$ , а не  $\omega$ .

У результаті, з (2.2.) *енергія*:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2} \quad (2.5)$$

де  $a_B$  – радіус Бора:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}. \quad \approx \quad (2.5a)$$

З другого постулату Бора (2.1) маємо *правило частот*:

$$\omega_{n'n} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right), \quad (2.6)$$

де  $R = Z^2 me^4 / 2\hbar^3$  – стала Рідберга - Рітца.

Це правило (2.6) емпірично встановив ще в 1885 році Й. Бальмер для  $n = 2$ . Пізніше, у 1907 році, В. Рітц сформулював цей комбінаційний принцип частот, який й названо його іменем.

Попередні роздуми показали, що постулати Бора правильно відображають існуючий стан речей. Але спроба застосувати борівську теорію до інших атомів не дала суттєвих результатів.

Одним з наслідків теорії Н. Бора для атома гідрогену є те, що момент кількості руху теж є квантований:

$$L = [\vec{r}_n \times m\vec{v}_n] = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.7)$$

Пізніше саме цей факт, а не квантування енергії з половинною частотою, Н. Бор узяв за основу – так звана умова квантування Бора (у 1922

році став лауреатом Нобелівської премії за заслуги у вивчення будови атома).

Надалі умови квантування (2.7), сформульовані Бором для моменту імпульсу, були узагальнені ним, а також П. Дебаєм (1913 р.), В. Вільсоном (1915 р.), А. Зоммерфельдом (1916 р.) для системи з декількома ступенями вільності: об'єм, обмежений траєкторією у фазовому просторі, містить ціле число елементарних квантів дії  $h = 2\pi\hbar$ :

$$\frac{1}{2\pi} \oint p_i dx_i = n_i \hbar, \quad n_i = 1, 2, \dots, \quad (2.8)$$

де  $i = 1, 2, \dots, s$ ;  $s$  – число ступенів вільності;  $p_i$ ,  $x_i$  – канонічно спряжені координати та імпульси.

Цю умову, відому як правило квантування Бора-Зоммерфельда, застосовували до багатоелектронних атомів, до атомів в електричному та магнітному полях, для врахування релятивістських ефектів (формула Зоммерфельда для тонкої структури спектра атома водню).

Однак ця, як її називають, «стара» квантова механіка не могла пояснити спектральних закономірностей багатоелектронних атомів і, навіть, найпростішого з них – атома гелію; залишались без пояснень інтенсивності спектральних ліній атомів. Відчувалось, що потрібна нова квантова теорія, і вже з цих позицій Н. Бор сформулював принцип відповідності, згідно з яким у границі великих, макроскопічних траєкторій частинок квантова механіка повинна переходити у класичну механіку. *Цей принцип був ключем до “вгадування” квантових формул.*

## 2.2. Хвилі матерії

*Гіпотеза де Бройля.* Поштовхом до створення «нової» квантової механіки стала ідея молодого французького фізика Луї де Бройля (1892-1987). Він висловив думку про те, що подібно до того, як випромінювання має властивості частинок, частинки речовини мають властивості хвиль та у 1923-1924 роках він висунув припущення, що із кожною вільною частинкою, що має енергію  $E$  та імпульс  $\vec{p}$ , пов'язана певна хвиля з частотою (1.33):

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.9)$$

та довжиною хвилі:

$$\lambda_{\text{Б}} = \frac{2\pi\hbar}{p} \equiv \frac{h}{p}. \quad (2.10)$$

Такі асоційовані з частинками хвилі називають хвилями де Бройля, а останній вираз (2.10) – співвідношенням де Бройля, з якого випливає **зв'язок між хвильовим вектором  $\vec{k}$  дебройлівської хвилі та вектором імпульсу частинки:**

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \quad (2.11)$$

Вирази для частоти (2.9), довжини хвилі (2.10) та хвильового вектора (2.11) за формою і змістом збігаються з відповідними співвідношеннями для фотонів, отже гіпотеза де Бройля по суті стверджує, що:

- частинки матерії будь-якої природи виявляють і корпускулярні, і хвильові властивості, між якими існує універсальний зв'язок.

В одновимірному випадку хвиля де Бройля:

$$\psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}, \quad (2.12)$$

де згідно (1.33)  $\omega = E/\hbar$ ;  $E$  – енергія частинки;  $k$  – хвильовий вектор (2.11).

Зміст цієї функції  $\psi(x,t)$  був з'ясований пізніше, наразі йшлося лише про зіставлення з частинкою деякого хвильового процесу.

У цій інтерпретації умова квантування Бора зводиться до того, що **на орбіті електрона в атомі вкладається ціле число хвиль де Бройля**. Для колової орбіти радіуса  $a$  (коли  $a$  не залежить від координат)

$$L = ap = a \frac{2\pi\hbar}{\lambda_{\text{Б}}} = n\hbar, \quad (2.13)$$

тобто:

$$\frac{2\pi a}{\lambda_{\text{Б}}} = n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

У 1929 році Луї де Бройль отримав Нобелівську премію за відкриття хвильової природи електрона.

Тоді припущення де Бройля багато фізиків сприймало як абсурд. У 1925 році А. Айнштайн порадив М. Борнові прочитати дисертацію де Бройля, зауваживши при цьому: «Прочитайте її. Хоч і видається, що її писав несповна розуму, написана вона солідно!».

### 2.3. Дифракція частинок

Гіпотеза де Бройля пізніше отримала визнання й лягла в основу квантової механіки – теорії, що адекватно відображає *некласичну поведінку мікрочастинок*. Цьому сприяло досить швидке її експериментальне підтвердження Девіссоном і Джермером у дослідах по розсіюванню електронів.

Схема цих дослідів була така. Вузький пучок електронів, які проходили прискорювальне електричне поле із заданою напругою  $U$  і набували кінетичну енергію  $K = eU$ , спрямовувався по нормалі на відполіровану плоску поверхню досліджуваної пластинки-мішені (рис. 1.6, *a*) і вимірювався розподіл відбитих електронів по кутах розсіювання  $\varphi$ . Для уловлювання та реєстрації розсіяних електронів використовувався металевий порожнистий циліндр із малим отвором, заземлений через гальванометр  $\Gamma$ . Кількість розсіяних під заданим кутом  $\varphi$  електронів  $N(\varphi)$  визначалася за величиною струму через гальванометр.

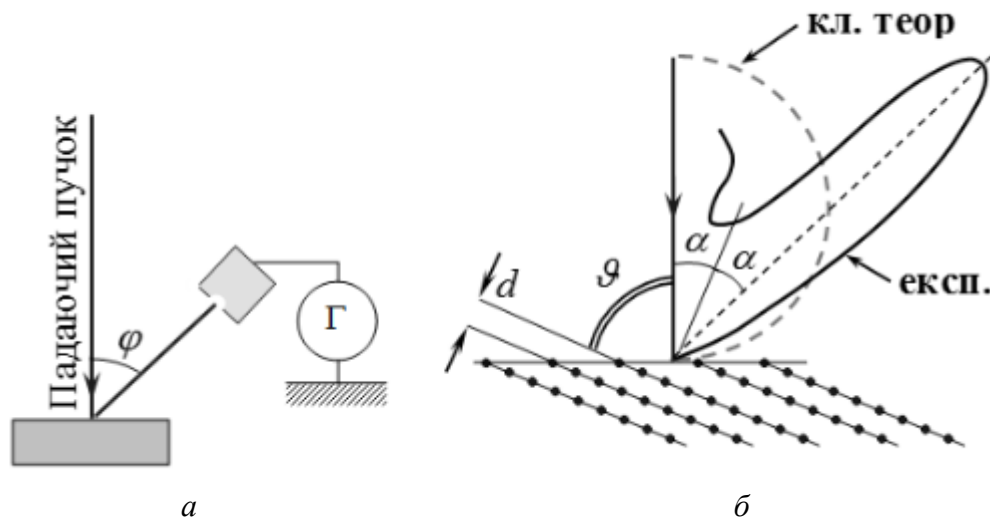


Рис. 1.6

З класичної точки зору розсіювання електронів на пластинці зумовлене зіткненням одних мікроскопічних кульок – електронів з іншими мікроскопічними кульками – атомами поверхневого шару мішені. За таких умов максимальна кількість частинок відбивається у зворотному напрямку ( $\varphi=0$ ) і монотонно зменшується до нуля при  $\varphi=90^\circ$ , як показано в полярних координатах на рисунку 1.5, *б* штриховою кривою. Форма такої кривої відображує закон розподілу, а відстань від початку координат до

якоїсь її точки визначає кількість електронів розсіяних під заданим кутом  $\varphi=0$ .

За класичною теорією закон розсіювання не має залежати від кінетичної енергії та імпульсу частинок. Але при опроміненні електронами монокристалів Девіссон і Джермер спостерігали на кривих розсіювання піки (суцільна лінія на рисунку 1.5, б), положення яких залежить від речовини мішені та енергії електронів. Зокрема, в одному з дослідів при опроміненні нікелю електронами з енергією  $K = 54$  еВ було отримано значення  $\varphi=50^\circ$ .

Указані піки нагадують дифракційні максимуми рентгенівських променів при відбиванні від кристалів, які задовольняють умову Вульфа-Бреггів:

$$2d \sin \vartheta = \lambda, \quad (2.15)$$

де  $d$  – відстань між атомними площинами, від яких відбиваються рентгенівські промені;  $\vartheta$  – кут ковзання, тобто кут між цими площинами та напрямком променів;  $\lambda$  – довжина хвилі рентгенівських променів.

Це наштовхнуло Девіссона і Джермера на думку, що пік розсіювання електронів має аналогічне походження й зумовлений дифракцією дебройлівських хвиль електронів на кристалічній ґратці мішені. Для перевірки такого припущення методом рентгеноструктурного аналізу була визначена орієнтація найщільніше заповнених атомами площин у мішені та відстань  $d$  між ними.

В ході експерименту з'ясувалось, що  $d = 9,1 \cdot 10^{-11}$  м, і кут ковзання  $\vartheta = 65^\circ$ . Це означало, що кут падіння пучка на атомні площини  $\alpha = 90^\circ - \vartheta = 25^\circ = \varphi/2$ , тобто максимум розсіювання спостерігається в напрямку дзеркального відбивання електронів. У такому разі, згідно з умовою (2.15), довжина хвилі, що дає дифракцію:

$$\lambda = 2d \sin \vartheta = 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-11} \sin 65 = 1,67 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Цю величину можна порівняти з дебройлівською довжиною хвилі електронів (2.2), які падають на мішень, урахувавши їхній імпульс:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}},$$

при  $U = 54$  В маємо:

$$\lambda_B = 1,65 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Майже точний збіг величин визначених довжин хвиль доводить дифракційну природу піків розсіяння в дослідах Девіссона і Джермера, а, отже, правильність гіпотези де Бройля. Варто відмітити, що навіть невеличка різниця між розрахунковим значенням довжини хвилі та вимірним і знайшла пояснення: вона зумовлена деякою зміною дебройлівської довжини хвилі електронів у мішені порівняно з вакуумом, тобто ефектом заломлення.

Пізніше інші дослідники спостерігали дифракцію нейтронів та легких атомів і молекул. Це засвідчило, що хвильові властивості притаманні всім мікрочастинкам, а не лише електронам. Більш за те, хвильові властивості частинок знайшли практичне застосування в таких галузях експериментальної та прикладної фізики, як електронна мікроскопія, електронографія та нейтронографія, електронна та нейтронна дефектоскопія, тощо.

## 2.4. Хвильова функція

### 2.4.1. Швидкість хвиль де Бройля

Дebroйлівська хвиля є невід'ємною приналежністю частинки і не віддільна від неї. Тому швидкість дебройлівської хвилі має збігатись із швидкістю руху частинки. Спочатку визначимо фазову швидкість хвилі де Бройля, котра через енергію  $E$  (2.9) та імпульс  $p$  частинки (2.11) визначається як:

$$v_{\Phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{p} = \frac{E}{p}. \quad (2.16)$$

Для елементарної частинки реальним є рух із релятивістською швидкістю, тому її енергія пов'язана з імпульсом співвідношенням

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} \quad (2.17)$$

де  $m$  – маса спокою частинки.

Відповідно, для фазової швидкості виходить з (2.16) та (2.17):

$$v_{\Phi} = \frac{c\sqrt{p^2 + m^2c^2}}{p} = c\sqrt{1 + \left(\frac{mc}{p}\right)^2} \Rightarrow v_{\Phi} > c.$$

Як бачимо, фазова швидкість хвиль де Бройля є більшою за граничну швидкість  $c$ . Саме по собі це не є чимось неможливим, оскільки реальною

швидкістю поширення хвилі є групова швидкість та для дебройлівської хвилі вона виражається як:

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dp} \left( c\sqrt{p^2 + m^2 c^2} \right) = \frac{c}{\sqrt{1 + \left( \frac{mc}{p} \right)^2}}. \quad (2.18)$$

Підставивши у (2.18) вираз релятивістського імпульсу:

$$p = m\upsilon / \sqrt{1 - (\upsilon/c)^2},$$

після деяких перетворень отримаємо:

$$u = \upsilon.$$

Таким чином, швидкість руху частинки збігається із груповою швидкістю її дебройлівської хвилі.

Отриманий результат дозволяє трактувати асоційовану хвилю як зв'язаний із частинкою хвильовий пакет, тобто «згусток коливань». Отже, інформацію про місцеположення (вважатимемо, що воно визначається однією координатою  $x$ ) і рух мікрочастинки можна отримати, не розглядаючи її як матеріальну точку, а досліджуючи асоційовану з нею хвилю. Саме такий підхід використовується у квантовій (хвильовій) механіці.

#### **2.4.2. Хвильова функція.**

Відповідно, основним поняттям квантової механіки є хвильова функція частинки  $\psi(x, t)$  – функція координат і часу, що визначає параметри асоційованої з частинкою хвилі в будь-якій точці простору й у будь-який момент часу. Тому важливо розуміти природу дебройлівських хвиль і зміст хвильової функції.

І перше, що спадає на думку це, що сама частинка і є дебройлівським пакетом, тобто мікроскопічним згустком хвиль. Але таке просте уявлення не витримує критики хоча б тому, що елементарна частинка є неподільною, а хвиля на межі дотику двох середовищ ділиться, частково відбиваючись і частково проходячи з одного середовища в інше. До того ж з'ясувалося, що хвильова функція є суттєво комплексною, причому і дійсна, і уявна її складові містять інформацію про фізичний стан частинки. Це змушує визнати, що дебройлівська хвиля як така *не може бути якимось фізичним процесом у самій частинці чи в прилеглому до неї просторі.*

Загально прийнята інтерпретація хвильової функції належить М Борну. Для кращого її розуміння проаналізуємо досліди по дифракції електронів на щілині. Пучок електронів із заданою дебройлівською довжиною хвилі (монохроматичний пучок) спрямовується нормально на вузьку щілину і вимірюється розподіл електронів на розміщеному за щілиною екрані-детекторі (рис. 1.7).

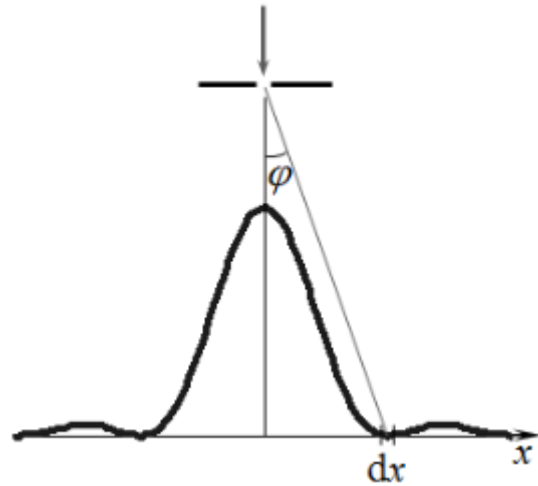


Рис. 1.7

Таким детектором може бути чутлива фотопластинка, на якій в місці потрапляння електронів виникає почорніння, або люмінесцентний екран із чутливим фотоприймачем, який дозволяє реєструвати короткі спалахи світла в місцях потрапляння на екран електронів. Досліди показали, що при інтенсивному опроміненні щілини електрони утворюють на екрані систему максимумів і мінімумів інтенсивності  $I(x)$ , положення яких збігається з положенням дифракційних смуг дебройлівських хвиль електронів.

Інтенсивність пучка в заданій точці екрана  $I(x)$  то є кількість електронів  $dN_x$ , які потрапляють у задану елементарну смужку на екрані за одиницю часу, віднесена до її ширини  $dx$ :

$$I(x) = \frac{dN_x}{dx}.$$

З іншого боку, позаяк величина  $I(x)$  визначається законом дифракції дебройлівських хвиль, вона має бути прямо пропорційною квадратові їхньої амплітуди і визначатися за правилами алгебри комплексних величин як

$$I(x) \sim |\psi(x)|^2 \equiv \psi(x)\psi^*(x),$$

де  $\psi^*(x)$  – комплексно спряжена функція.

Отже, кількість електронів, що потрапляють у дане місце на екрані є прямо пропорційною квадрату модуля хвильової функції у цьому місці:

$$dN_x \sim |\psi(x)|^2 dx. \quad (2.19)$$

Цілком можливо припустити, що причиною "хвильової" поведінки електронів у пучку є якась специфічна взаємодія між ними. Для перевірки

такого припущення описаний дослід був повторений при гранично слабкому потоці електронів, коли *електрони проходили крізь щілину по одному з інтервалом часу в десятки тисяч разів більшим, ніж час їхнього прольоту через всю установку*. Тож взаємодія між електронами виключалась. Такий дослід дав наступні результати:

1. Кожен окремий електрон потрапляє в певну точку екрана, а не створює мікроскопічну дифракційну картину. Отже, при взаємодії з екраном електрон виявляє себе не як хвиля, а як корпускула (точковий об'єкт).

2. Окремі електрони потрапляють у різні точки екрана не передбачувано, так що неможливо знати, в яку саме точку потрапить наступний електрон.

3. В різні області екрана електрони потрапляють не однаково часто, а так що після тривалого опромінювання щілини утворюється така сама дифракційна картина, як і при короткочасному опроміненні інтенсивним пучком.

З наведених результатів випливає, що потрапляння окремого електрона в задану область екрана відбувається не обов'язково, а *лише з певною імовірністю*.

Тому кількість електронів  $dN_x$ , які потрапляють у задану гранично вузьку область ширини  $dx$  (рис. 1.7), можна виразити:

$$dN_x = N dP_x,$$

де  $N$  загальна кількість електронів, які пройшли крізь щілину, а  $dP_x = dN_x / N$  – *імовірність* (шанс) потрапляння окремого електрона в область  $dx$ .

Зрозуміло, що ця імовірність є прямо пропорційною ширині смужки, тож можна записати:

$$dP_x = \rho(x) dx, \quad (2.20)$$

де величина:

$$\rho(x) = \frac{dP_x}{dx} = \frac{dN_x}{N dx}. \quad (2.21)$$

називається *густиною імовірності або функцією розподілу і визначає імовірність потрапляння окремого електрона в смужку одиничної ширини, розташовану в околі заданої точки*.

Відповідно, *імовірність перебування частинки у скінченній області шириною  $[x_1, x_2]$  визначається, як*

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx.$$

Таким чином, кількість електронів, які потрапляють в елементарну область  $dx$  на екрані, виражається через густину імовірності  $\rho(x)$ :

$$dN_x = N\rho(x)dx.$$

Порівнюючи цей вираз із виразом (2.19), доходимо висновку, що *густина імовірності потрапляння електрона в дану точку екрана є прямо пропорційною квадрату модуля його хвильової функції в цій точці:*

$$\rho(x) \sim |\psi(x)|^2. \quad (2.22)$$

*Сама ж хвильова функція, як відмічалось вище, безпосереднього фізичного змісту не має.*

Це дозволяє підбирати (нормувати) амплітуду хвильової функції так, аби виконувалася рівність  $\rho(x) \sim |\psi(x)|^2$  і говорити, що *квадрат модуля хвильової функції частинки в будь-якій точці простору в даний момент часу дорівнює густині ймовірності перебування частинки в цій точці й у цей момент:*

$$\boxed{|\psi(x,t)|^2 \equiv \psi(x,t)\psi^*(x,t) = \rho(x,t)}. \quad (2.23)$$

Таке статистичне трактування хвильової функції, запропоноване М. Борном, було підтверджено всім подальшим розвитком квантової механіки і є загально визнаним.

Отже, *дебройлівські хвилі є не реальними фізичними хвилями, а "хвилями імовірності", або "хвилями інформації".*

Це накладає на хвильову функцію частинки досить жорсткі математичні обмеження:

I. Імовірність події, що може відбутися в даному місці і в даний час, не може мати одразу двох або більше значень. Тому *хвильова функція має бути однозначною.*

II. Положення та швидкість частинки не можуть змінюватися миттєво, тому хвильова функція разом із своїми похідними *повинна бути "гладкою".*

III. Імовірність за означенням не може бути більшою за одиницю, отже, хвильова функція *має бути обмеженою*. Ця вимога виражається умовою нормування хвильової функції:

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad (2.24)$$

де інтегрування ведеться по всій області існування підінтегральної функції, тобто по області, де може знаходитися частинка.

Умова нормування має простий зміст – вона *формально виражає сам факт присутності частинки в заданій області простору протягом заданого інтервалу часу*.

## Контрольні запитання до лекції 2

1. Що таке атомні спектри, і як вони класифікуються?
2. Сформулюйте основні постулати борівської моделі атома гідрогену.
3. Як Бор пояснив дискретність спектра випромінювання атома гідрогену?
4. Запишіть рівняння для енергії електронних рівнів у борівській моделі атома та поясніть його фізичний зміст.
5. Що таке момент кількості руху, і як він квантується у моделі Бора?
6. У чому полягає гіпотеза де Бройля про хвилі матерії?
7. Як експериментальна дифракція електронів підтвердила хвильові властивості матерії?
8. Що таке хвильова функція? Яке її фізичне значення в квантовій механіці?
9. Запишіть рівняння Шредінгера для частинки у потенційному полі та поясніть його зміст.
10. Як принцип невизначеності Гейзенберга узгоджується з хвильовими властивостями частинок?

# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## Лекція 3

### Принцип невизначеності Гайзенберга. Приклади застосування співвідношення невизначеностей Гайзенберга



#### 3.1. Принцип невизначеності Гайзенберга

Народження квантової механіки почалося з роботи німецького фізика-теоретика Вернера Гайзенберга (1901-1976), яку він написав у червні 1925 року. Гайзенберг уважав, що розумно відмовитись від неспостережуваних величин (типу координат та періоду обертання електрона) і побудувати механіку, в якій були б співвідношення лише між спостережуваними величинами (типу частот переходу між квантовими станами, інтенсивності випромінювання при цьому переході тощо). Він побудував таку формальну схему квантової механіки, у якій, замість координати  $x$  та імпульсу  $p$  електрона, фігурували деякі абстрактні алгебраїчні об'єкти  $x_{mn}$  та  $p_{mn}$ , для яких не виконуються правила комутативності при множенні.

Професор М. Борн, якому В. Гайзенберг надіслав свій рукопис, розпізнав у цих правилах множення правила для відомих у математиці матриць, і разом з П. Йорданом вони показали, що матриці  $\hat{x}$  та  $\hat{p}$  задовольняють переставне співвідношення:

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar,$$

яке є новим правилом квантування, і створили те, що має тепер назву матричної квантової механіки (за створення квантової механіки в матричній формі В. Гайзенберг у 1932 році був нагороджений Нобелівською премією).

У 1926 році М. Борн, Н. Вінер, П. А. М. Дірак, Г. Вейль сформулювали принцип, згідно з яким кожній фізичній величині ставиться у відповідність оператор. Як з'ясувалось пізніше, таке зіставлення не є простою процедурою, і питання однозначності "приписування" фізичним величинам операторів дискутується досі.

У 1927 році В. Гайзенберг відкрив співвідношення невизначеностей для середньоквадратичних відхилень канонічно спряжених координати  $x$  та імпульсу  $p$ :

$$\langle \langle \Delta x \rangle^2 \rangle \langle \langle \Delta p \rangle^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Інтерпретація гайзенберґівського принципу невизначеності та фізичний зміст хвильової функції як амплітуди ймовірностей були предметом дискусій на багатьох фізичних конгресах. Наша логіка, що ґрунтується на повсякденному досвіді макроскопічного світу, є класичною з її твердженнями “так” або “ні”, вона не допускає того, що ми називаємо дифракцією електронів, і це привело до формулювання багатьох парадоксів: парадокс де Бройля, парадокс із живомертвим котом Шрґьодінґера, парадокс Айнштайна- Подольського-Розена (1935), які були предметом відомих дискусій: “двобію” Н. Бора й А. Айнштайна. Одним із результатів цих дискусій є принцип доповнюваності Бора (1927 р.): вимірювання імпульсно-енерґетичних та просторово-часових характеристик є взаємодоповнювальними в описі квантового об’єкта.

Таким чином, через наявність у частинки хвильових властивостей неможливо одночасно точно вказати її координату та імпульс. Те саме стосується і пар деяких інших фізичних величин, які визначають стан мікрочастинки. Існування подібних обмежень відображає один із основних постулатів квантової фізики – принцип невизначеності:

*Існують такі пари фізичних величин – характеристик стану мікрочастинки, котрі точно вказати разом є принципово неможливо; їх можна задати тільки з невизначеностями, добуток яких не може бути меншим за величину порядку сталої Планка.*

Математично цей принцип виражається співвідношеннями невизначеностей або нерівностями Гайзенберґа. Для пари координата-імпульс вони виглядають так:

$$\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq \hbar, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq \hbar, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq \hbar. \end{aligned} \tag{3.1}$$

З інших величин наведемо співвідношення невизначеностей для пари енерґія-час:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \tag{3.2}$$

де  $\Delta E$  – невизначеність енерґії частинки в цьому процесі чи стані;  $\Delta t$  – тривалість процесу або час існування («час життя») даного стану частинки.

Із приводу нерівностей Гайзенберг а треба зауважити таке. Не лише координати, ай сама область просторово-часової локалізації квантової частинки не визначена точно. До того ж і критерії оцінки невизначеностей окремих величин у різних задачах можуть відрізнятися. Через це в теоретичні фізиці в співвідношеннях (3.1) і (3.2) замість  $\hbar$  пишуть  $\hbar/2$ , а в підручниках із загальної фізики замість й можна зустріти також величину  $h$ .

Те, як "працює" принцип невизначеності можна прослідкувати на прикладі розглянутого *вище дифракційного дослід з електронами* (див. тема 2). Положення кожного електрона в момент прольоту крізь щілину (рис. 1.8) відоме з невизначеністю, рівною ширині щілини:  $\Delta x = b$ . При цьому імпульс електрона при підльоті до щілини, в принципі, точно відомий:  $p = \sqrt{2meU}$ , де кінетична енергія  $K = eU$ , яку електрон отримує в прискорюючому полі з напругою  $U$  перед тим, як потрапити на щілину.

Тому може здатися, що, зменшуючи ширину щілини, вдасться з будь-якою потрібною точністю визначити як імпульс, так і координату електрона. Але така можливість є примарною. Унаслідок дифракції в момент прольоту крізь щілину імпульс електрона неконтрольовано змінюється так, що він може потрапити в будь-яку точку на екрані. Це означає, що, визначаючи положення електрона в момент проходження щілини, ми вносимо в його імпульс невизначеність  $\Delta p_x$ , рівну (рис. 1.8):  $\Delta p_x$

$$\Delta p_x = p \operatorname{tg} \varphi, \quad (3.3)$$

де  $\varphi$  – кут дифракції.

Переважає більшість електронів після проходження щілини потрапляє в область центрального максимуму дифракції, межі якого визначаються умовою:

$$b \sin \varphi = \lambda, \quad (3.4)$$

де  $b = \Delta x$  – невизначеність координати електрона;  $\lambda$  – його дебройлівська довжина хвилі.

При цьому для мікрочастинок кути дифракції завжди малі. Тому, зробивши в (3.3) заміну  $\operatorname{tg} \varphi = \sin \varphi$  і врахувавши умову (3.4) та співвідношення (2.10), отримуємо

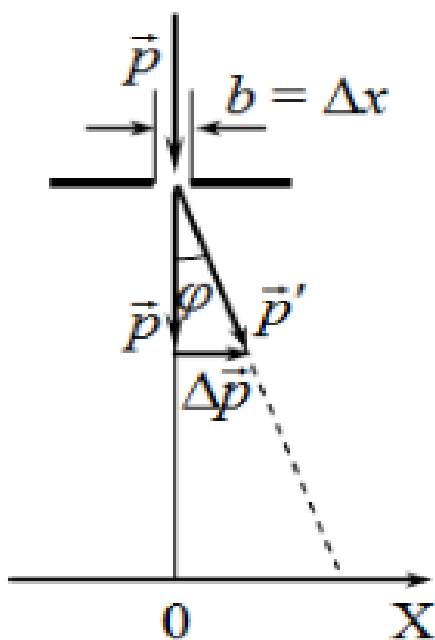


Рис. 1.8

результат, який узгоджується із співвідношеннями невизначеності (3.1):

$$\Delta x \Delta p_x \approx p \lambda \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \approx h. \quad (3.5)$$

**Зміст принципу невизначеності.** Аналізуючи розглянутий приклад, можна подумати, що невизначеності координати та імпульсу частинки є звичайними похибками експерименту, яких можна уникнути, вимірюючи положення частинки якимось іншим методом, наприклад, за допомогою мікроскопа. Але це не так. При спостереженні під мікроскопом об'єкт опромінюється світлом, тобто потоком фотонів, і реєструються відбиті від нього фотони, що потрапляють в об'єктив мікроскопа.

З теорії відомо, що точність визначення положення частинки за допомогою мікроскопа обмежена довжиною хвилі використаного світла, так що  $\Delta x \approx \lambda$ . З іншого боку, відбиваючись від частинки, фотон передає їй імпульс, вносячи невизначеність  $\Delta p_x \approx p = h/\lambda$ . Отже, знову маємо  $\Delta x \Delta p_x = h$ .

Аналіз й інших принципово можливих способів одночасного визначення координат та імпульсу частинки теж приводить до співвідношення невизначеностей. Така універсальність співвідношень (3.1) свідчить, що принцип невизначеності пов'язаний не з технічною обмеженістю точності вимірювань, а із самою природою мікрочастинок. Електрон не є частинкою в класичному сенсі (корпускулою), тому до нього не можна вповні застосовувати поняття та уявлення класичної фізики. Зокрема, зміну положення мікрочастинки в просторі з плином часу принципово не можна трактувати як рух точки по визначеній траєкторії.

**Тож нерівності Гайзенберга задають обмеження, які накладає природа мікрочастинок на застосування понять класичної механіки при описі їхнього руху.**

А в ширшому розумінні принцип невизначеності відображає обмежену можливість використання законів класичної фізики для адекватного відображення властивостей матерії на субмікроскопічному рівні.

### **3.1.1. Деякі наслідки з принципу невизначеності**

Із співвідношень Гайзенберга (3.1) випливає наступний парадоксальний для класичної механіки висновок. Якщо частинка є вільною, тобто може знаходитись у будь-якій точці простору, то її положення є повністю невизначеним  $\Delta x = \infty$ , тоді невизначеність імпульсу  $\Delta p = 0$ . При цьому частинка може як рухатися, так і перебувати в спокої. Але коли частинка заперта в обмеженій області, то  $\Delta x \neq \infty$ , тоді за будь-яких умов невизначеність імпульсу  $\Delta p \neq 0$ , отже й сам імпульс  $p \neq 0$ . Це означає, що квантова частинка, заперта в обмеженій області простору, принципово не може перебувати у стані спокою. При цьому, якщо  $\Delta x \approx \lambda$ , то:

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\lambda} \sim p,$$

тобто, *коли невизначеність місцеположення частинки є величиною порядку дебройлівської довжини хвилі, то невизначеність її імпульсу за порядком величини дорівнює самому імпульсу.*

#### ***Електрон в атомі гідрогену***

Для електрона, що перебуває в незбудженому або невисокому збудженому квантовому стані можна записати:

$$rp = r m v \approx \hbar, \quad (3.5)$$

де  $r$  – радіус атома (середня відстань електрона від ядра),  $m$  – маса електрона,

$v$  – його швидкість.

У не збудженому атомі Гідрогену швидкість електрона  $v \approx 2 \cdot 10^6$  м/с, тому із співвідношення (3.5) для поперечника атома гідрогену виходить оцінка  $d = 2r \approx 10^{-10}$  м, що співпадає з експериментальними даними.

#### ***Використання співвідношень невизначеності Гайзенберга в області ядерної фізики***

Невдовзі після відкриття атомного ядра з'ясувалося, о маси ядер ізотопів усіх хімічних елементів з великою точністю є кратними масі протона  $m_p$  – ядра найлегшого ізотопу гідрогену ( ${}^1_1\text{H}$ ), так що  $m_{\text{я}} = A m_p$ . Заряд ядра є кратним величині заряду електрона  $e$ :  $q_{\text{я}} = Ze$ , причому число  $A$  завжди суттєво перевищує  $Z$  (для легких елементів  $A \approx 2Z$ ). Тому спочатку думали, що ядро складається з  $Z$  масивних протонів і  $(A - Z)$  легеньких

електронів, які компенсують відповідну частку позитивного заряду ядра, практично не впливаючи на його масу. Але принцип невизначеності змусив відкинути таку можливість.

Розміри атомного ядра  $q_{\text{я}} \approx 10^{-14}$  м, отже, згідно з (3.1), електрони в ядрі мають рухатись із субсвітловою швидкістю  $v \approx 3 \cdot 10^8$  м/с. А при таких швидкостях сили притягання з боку протонів не здатні утримати електрон у ядрі. Тому в ядрі не може бути електронів, а відміна чисел  $Z$  і  $A$  зумовлена присутністю в ньому інших масивних частинок – нейтронів, які не мають електричного заряду.

### **3.1.2. Співвідношення невизначеностей «енергія-час»**

Одним із проявів співвідношення невизначеностей «енергія-час» (3.2) є так зване природне розширення спектральних ліній атомів. Відомо, що атоми випромінюють світло у вигляді квантів (фотонів) при переходах електронів із одних дискретних енергетичних рівнів на інші. Тому спектри випромінювання атомів складаються з окремих спектральних ліній, частоти яких мали би точно визначатися правилом частот (2.1). Але збуджені стани атома є нестабільними електрон перебуває на збудженому енергетичному рівні в середньому протягом так званого «часу життя»  $\tau \approx 10^{-8}$  с. Тому його енергія згідно з (3.2) має невизначеність  $\Delta E \approx \hbar/\tau$ , яка спричинює відповідну невизначеність частоти фотонів, що випромінюються:

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \approx \frac{1}{\tau} \approx 10^8 \text{ c}^{-1}.$$

Це означає, що при переході електрона між заданими двома рівнями за будь-яких умов випромінюються фотони не з однією, а з усіма частотами в указаному інтервалі  $\Delta\omega \approx 10^8 \text{ c}^{-1}$ . Тому спектральні лінії атомів є не дослівно «лінії», а вузькі смуги.

Слід зауважити, що в дійсності ширина спектральних ліній атомів ще більша, оскільки є й інші причини розширення, зокрема, тепловий рух атомів. Частоти видимого світла складають  $\omega \sim 10^{15} \text{ c}^{-1}$ , тому реальний ступінь монохроматичності випромінювання атомів:  $\omega/\Delta\omega$  є дуже високим. Але строго монохроматичного випромінювання в природі не існує. Таким чином, відома з оптики принципова немонохроматичність реального світла має квантово-механічну природу.

**Межі застосовності класичного способу опису.** Дифракційні ефекти спостерігаються не лише для електронів або нейтронів, а й для складних систем – атомів і молекул. Тому співвідношення де Бройля (2.10) і Гайзенберга (3.1), (3.2) слід трактувати як фундаментальні і принципово чинні для будь-якого матеріального об’єкта. Але добре відомо, що в багатьох випадках, наприклад, при аналізі теплового руху молекул газу в посудині або розрахунках руху електронів в електронній лампі, не виникає жодної потреби враховувати їх хвильові властивості. А ось при розгляді руху електронів у атомі без цього неможливо обійтися.

### 3.2. Приклади застосування співвідношення невизначеностей Гайзенберга

**Приклад 1.** Нехай маємо броунівську частинку – порошок масою  $m = 10^{-10}$  кг, яка рухається зі швидкістю  $v = 1$  см/с. При густині  $\rho = 2$  г/см<sup>3</sup> її розмір складає  $d = 0,05$  мм. Відмітимо, що хоча таку порошок можна побачити тільки в мікроскоп, вона складається з приблизно  $10^{15}$  молекул, тобто є *макроскопічною* частинкою. Згідно з (2.10), довжина хвилі де Бройля неї становить  $\lambda_B \approx 10^{-22}$  м, що в сто мільйонів разів менше, ніж розміри атомного ядра. Тож про хвильові властивості порошок немає мови.  $\lambda_B$

Спостерігаючи за частинкою через мікроскоп, ми можемо фіксувати її положення з невизначеністю  $\Delta x = 0,5$  мкм (довжина світлової хвилі), що становить всього 1% від розмірів частинки. При цьому, згідно з (3.1), невизначеність швидкості:

$$\Delta v \approx \frac{\hbar}{2\Delta m} = 2 \cdot 10^{-19} \text{ м/с.}$$

Отже, можна практично точно визначати положення частинки та її імпульс у кожен момент часу й описувати її рух на основі законів класичної механіки.

**Приклад 2.** Розглянемо тепер електрон ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг) в атомі Гідрогену, де його швидкість складає  $v \approx 2 \cdot 10^6$  м/с. При такій швидкості дебройлівська довжина хвилі електрона  $\lambda_B \approx 3 \cdot 10^{-10}$  м є сумірною з поперечником атома  $d \approx 10^{-10}$  м. Очевидно, що за таких умов ігнорувати хвильові властивості електрона й говорити про його рух навколо ядра по

певній траєкторії (орбіті) не можна. Справді, аби говорити про орбіту електрона навіть наближено, його положення в кожен момент часу має бути задане хоча б із невизначеністю  $\Delta x \sim 0,1d = 10^{-11}$  м. При цьому, згідно з (3.1), невизначеність швидкості електрона  $\Delta v \sim 10^7$  м/с. Отже, невизначеність швидкості  $\Delta v > v$ , і говорити про рух електрона навіть по наближено заданій траєкторії із наближено заданою швидкістю немає сенсу. Тому уживана фраза «орбітальний рух електронів у атомах» є тільки звичною умовністю.

**Приклад 3.** Розглянемо ще й випадок, коли елементарна частинка рухається у великій області простору. Прикладом може бути електронно-променева трубка (яку застосовують все рідше), в якій зображення створюється на люмінесцентному екрані при його бомбардуванні електронами.

Екран трубки має мозаїчну структуру і складається з безлічі мікрокристаликів люмінесцентної речовини розміром  $d \sim 10^{-6}$  м. При цьому незалежно від місця влучання електрона спалахує весь мікрокристалик. Тому немає жодної потреби фіксувати положення електрона в трубці точніше, ніж із невизначеністю  $\Delta x \sim 10^{-6}$  м, для якої згідно з (3.1) невизначеність швидкості складає  $\Delta v \sim 10^2$  м/с.

Якщо прийняти відстань від електронної гармати, що формує електронний пучок, до екрана  $l = 10$  см і швидкість електронів  $v = 10^6$  м/с, то відносні невизначеності будуть:

$$\frac{\Delta x}{l} \sim 10^{-5} \quad \text{та} \quad \frac{\Delta v}{v} \sim 10^{-4}.$$

Ці величини становлять теоретичні похибки розрахунку руху електронів вздовж визначеної траєкторії за законами класичної механіки і очевидно є не істотними.

Так само можна чинити й при розгляді руху вільних електронів у металі або молекул газу в посудині. Але до мікроскопічних частинок навіть у таких випадках класичний підхід не можна застосовувати беззастережно через наявність у них внутрішніх квантових властивостей. Зокрема з цієї причини є неповною класична теорія електропровідності металів, хоча рух вільних електронів відбувається в об'ємі всього провідника, тобто в макроскопічній області простору.

Аналізуючи наведені приклади, можна зробити певні **загальні висновки:**

- ✓ матеріальні точки й тіла класичної механіки не виявляють хвильових властивостей в силу своєї мікроскопічності, тобто, через те, що вони складаються із гігантської кількості мікроскопічних частинок;
- ✓ якщо істинно мікроскопічні (елементарні) частинки рухаються в макроскопічній області простору, то з певними застереженнями їх теж можна розглядати як матеріальні точки й застосовувати до них закони класичної механіки;
- ✓ але мікрочастинки, що локалізовані в мікроскопічних областях простору, демонструють яскраво виражену неklasичну поведінку, і їхній рух можна досліджувати тільки на основі законів квантової механіки.

### **Контрольні запитання до лекції 3**

1. Сформулюйте принцип невизначеності Гейзенберга та запишіть відповідне математичне співвідношення.
2. Що означає принцип невизначеності з точки зору вимірювань фізичних величин?
3. Як принцип невизначеності пояснює неможливість одночасного точного вимірювання координати та імпульсу частинки?
4. Які фундаментальні фізичні наслідки випливають із принципу невизначеності?
5. Як співвідношення невизначеності застосовується до електрона в атомі гідрогену?
6. Поясніть застосування принципу невизначеності до розсіювання частинок у мікросвіті.
7. Як принцип невизначеності впливає на поняття нульової енергії у квантових системах?
8. Чому неможливо одночасно точно визначити енергію та час у квантовій механіці?
9. Як співвідношення невизначеностей пояснює існування віртуальних частинок у квантовій електродинаміці?
10. Наведіть приклад застосування принципу невизначеності у сучасних технологіях.

# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## Лекція 4

**Рівняння Шрєдингера Застосування рівняння Шрєдингера: частинка в одновимірному потенціальному ящику; частинка у тривимірному потенціальному ящику. Лінійний гармонічний осцилятор. Тунельний ефект.**



### 4.1. Рівняння Шрєдингера

Еквівалентність двох квантових механік, матричної і хвильової, довів Е. Шрєдингер (1926 р.). Ще до створення хвильової механіки після відкриття матричної квантової механіки М. Борн, В. Гайзенберг і П. Йордан, натрапляючи на труднощі з матричним численням, звернулись до видатного німецького математика Д. Гільберта (1862-1943). Великий математик, який жваво цікавився новими ідеями фізиків (зокрема, він дещо раніше за А. Айнштейна винайшов рівняння руху гравітаційного поля в загальній теорії відносності, відомі як рівняння Айнштейна- Гільберта), відповів їм, що завжди, коли йому доводилося мати справу з матрицями, вони виникали при знаходженні власних значень у крайових задачах для диференціальних рівнянь. Гільберт і порадив їм пошукати диференціальне рівняння, пов'язане з цими матрицями, і можливо, знайдеться щось нове. Однак цю ідею фізики не сприйняли, вважаючи її несерйозною, і Гільберт пізніше кепкував з них, але саме це рівняння знайшов Шрєдингер.

У 1926 році М. Борн, Н. Вінер, П. А. М. Дірак, Г. Вейль сформулювали принцип, згідно з яким кожній фізичній величині ставиться у відповідність оператор. Як з'ясувалось пізніше, таке зіставлення не є простою процедурою, і питання однозначності "приписування" фізичним величинам операторів дискутується досі.

Улітку 1925 року професор Ервін Шрєдингер (1887-1961) з Цюрихського університету ознайомився з гіпотезою де Бройля. Є спогади П. Дебая, що це він запропонував Е. Шрєдингеру, який працював у нього на кафедрі, доповіді на семінарі роботу де Бройля. Шрєдингер негативно ставився до ідеї де Бройля, але зробив доповідь, оскільки Дебай наполіг на

цьому. Готуючись до цього семінару, Шрьодінгер і винайшов своє рівняння (1926 р):

1. Хвиля де Бройля  $\psi(x,t)$  повинна задовольняти *хвильове рівняння*, у разі одновимірного випадку:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}, \quad (4.1)$$

де  $v = \omega/k$  – фазова швидкість.

2. Крім того вона має одночасно *задовольняти співвідношення для енергії* (1.33) та *імпульсу частинки*:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k. \quad (4.2)$$

3. Згадаємо, що *повна енергія частинки*:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (4.3)$$

де  $U(x)$  – потенціальна енергія частинки.

Остаточно *одновимірне рівняння Шрьодінгера*:

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - U(x)\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}. \quad (4.4)$$

Як ми знаємо, головним завданням механіки є визначення місцеположення частинки в будь-який момент часу при розгляді її руху. В класичній механіці Ньютона воно вирішується шляхом розв'язання диференціального рівняння, яке виражає другий закон Ньютона:

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \frac{\vec{F}(\vec{r}, t)}{m}. \quad (4.5)$$

Інтегруванням рівняння (4.5) можна отримати закон руху  $\vec{r} = \vec{r}(t)$ , а по тому й рівняння імпульсу частинки  $\vec{p}(t) = m(d\vec{r} / dt)$ . 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 треба говорити не про точні значення  $\vec{r}$  і  $\vec{p}$  у кожен момент часу, а тільки про ймовірності їхніх можливих значень. Цю та іншу інформацію про стан частинки містить її хвильова функція, визначення якої і є основним завданням квантової механіки.

Саме рівняння Шрьодінгера – диференціальне рівняння, яке задовольняє хвильова функція частинки в загальному випадку і є вирішення цієї задачі.

В *декартових координатах воно має вигляд:*

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - U\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.6)$$

Тут  $\psi = \psi(x, y, z, t)$  – хвильова функція;  $U = U(x, y, z, t)$  – функція потенціальної енергії частинки, котра визначає силове поле, в якому вона знаходиться;  $i = \sqrt{-1}$  – уявна одиниця;  $\hbar$  – стала Планка,  $m$  – маса частинки.

Рівняння (4.6) можна записати більш зручно та інваріантно щодо вибору системи координат, позначивши вираз у дужках через символ оператора Лапласа:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - U\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.7)$$

Стосовно цього рівняння слід одразу зауважити таке.

*По-перше*, його не можна вивести математично з якихось інших формальних положень.

Тому *рівняння Шрьодінгера (4.7) 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 (4.7) не є чинним при швидкостях сумірних із граничною швидкістю  $c$ .

У квантовій механіці важливе місце посідає дослідження стану частинок, які знаходяться в стаціонарних (не залежних від часу) силових полях  $U = U(x, y, z)$ .

За такої умови розподіл імовірностей для величин, які визначають стан частинки, теж є стаціонарним і, як доводиться в математиці, хвильову функцію частинки можна записати у вигляді:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t}, \quad (4.8)$$

де з (4.7)  $\omega = E/\hbar$ ;  $\psi(x, y, z)$  – "координатна" хвильова функція.

Ця функція розв'язком більш простого, ніж (4.7), *стаціонарного рівняння Шрьодінгера*:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0, \quad (4.9)$$

де  $E$  – повна енергія частинки.

Слід зазначити, що інтегрування рівнянь (4.7) і (4.9) звичайно пов'язане з великими математичними труднощами. Тому далі детальний розгляд проводиться тільки для декількох найпростіших задач важливих для розуміння квантовомеханічного способу опису та загальних рис поведінки мікрочастинок.

## 4.2. Частинка в одновимірному потенціальному ящику

**Постановка задачі.** Уявімо 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  $U(x)$  скрізь всередині ящика дорівнює нулю, а на стінках стрибком зростає і може бути якою завгодно, як показано на рисунку 1.9.

Отже, можна говорити, що частинка в ящику рухається в такому силовому полі, де її потенціальна енергія  $U = 0$  в області шириною  $l$  і  $U \rightarrow \infty$  за її межами. Фраза досить громіздка. Тому для характеристики типових силових полів використовують відповідні терміни.

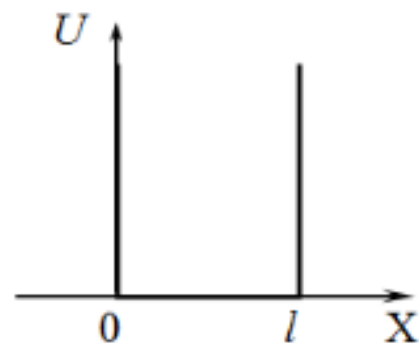


Рис. 1.9

Зокрема, *описане поле називають потенціальним ящиком або потенціальною ямою з нескінченно високими вертикальними стінками.*

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 (4.9).

Складемо його, спрямувавши координатну вісь ОХ уздовж напрямку руху частинки. В такому разі хвильова функція є функцією тільки однієї змінної  $\psi(x)$  і  $\nabla^2\psi = \partial^2\psi/\partial x^2$ . Через непроникність стінок частинка не може опинитися за межами ящика ні за яких умов. Отже, хвильова функція існує тільки в області  $x \in [0, l]$ , де  $U(x) = 0$ . Тому рівняння (4.9) буде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0, \quad (4.10)$$

Де уведено позначення:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (4.11)$$

При цьому з вимоги неперервності хвильової функції (п.2.4) впливає, що вона дорівнює нулю не тільки за межами ящика, а й на його стінках:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (4.12)$$

**Хвильові функції. Квантові стани.** З математики відомо, що розв'язками рівняння (4.10) є гармонічні функції, тож можна записати:

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha), \quad (4.13)$$

де  $A$  та  $\alpha$  – довільні константи (сталі інтегрування).

Але з усієї множини розв'язків (4.13) хвильовими функціями частинки є лише ті, що задовольняють вимоги однозначності, неперервності та обмеженості (див. тема 2).

Усі функції (4.13) є однозначними та обмеженими, але неперервними з них є лише ті, що задовольняють умови (4.12). При цьому з умови  $\psi(0) = 0$  впливає:

$$A \sin \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0,$$

отже:

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (4.14)$$

А з другої умови  $\psi(l) = 0$ , маємо:

$$\sin kl = 0 \Rightarrow kl = \pm \pi n. \quad (4.15)$$

Отже, параметр  $k$  може мати лише дискретні значення:

$$k_n = \pm \frac{\pi}{l} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.16)$$

Тоді зі всієї множини розв'язків (4.13) хвильовими функціями частинки є лише окремі (дискретні) функції:

$$\psi_n(x) = \pm A \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.17)$$

Відмітимо, що у множині чисел  $n$  (4.17) відсутнє значення  $n = 0$ , хоча формально воно задовольняє вимогі  $\psi(l) = 0$ . Це й зрозуміло, адже при  $n = 0$  хвильова функція  $\psi_0(x) = 0$  при будь-яких значеннях  $x$ , у тому числі і всередині ящика. Отже, значення  $n = 0$  відповідає порожньому ящику.

Амплітуди  $A$  хвильових функцій визначаються з умови нормування (4.12):

$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi x}{l} n\right) dx = 1 \Rightarrow \frac{A^2 l}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

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

$$\psi_n(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.18)$$

Хвильова функція повністю визначає стан мікрочастинки. Тому дискретність функцій (4.18) означає, що для частинки в ящику можливі не будь-які, а лише окремі дозволені стани. Це явище називається **квантуванням**, а самі дозволені стани **квантовими станами**.

**Енергетичний спектр.** Кожна хвильова функція  $\psi_n$  і кожен квантовий стан частинки в ящику визначається відповідним значенням параметра  $k_n$ , який пов'язаний із енергією частинки формулою (4.11). Тому, врахувавши вираз (4.16), отримаємо:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.19)$$

Отже, енергія частинки в ящику теж є квантованою: *в кожному дозволеному стані вона може мати тільки відповідне значення з набору (4.19), який називається енергетичним спектром частинки.* Кожне дозволене значення енергії  $E_n$ , утворює відповідний *енергетичний рівень*, а число  $n$  називається *головним квантовим числом* цього рівня.

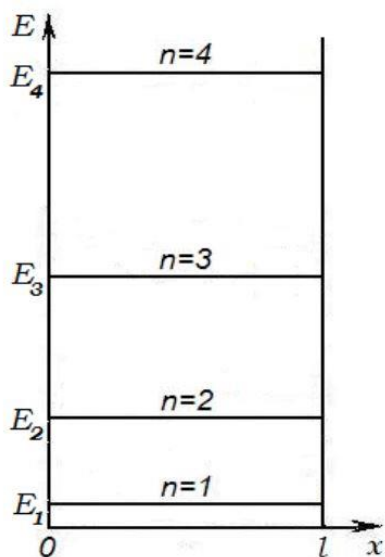


Рис. 1.10

Наочно енергетичні рівні зображують горизонтальними відрізками на енергетичній діаграмі (рис. 1.10).

Іншою особливістю енергетичного спектра (4.19) є те, що найнижчий енергетичний рівень не дорівнює нулю:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot n^2 \quad (4.20)$$

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 заданий точно:  $p = 0$ , тож невизначеність імпульсу  $\Delta p = 0$ . Але це суперечить співвідношенням Гайзенберга (3.1): оскільки невизначеність координати частинки в ящику  $\Delta x \leq l$ , то повинно бути  $\Delta p \geq \hbar/l$ . Якщо прийняти мінімальний імпульс частинки  $p_{\min} \sim \hbar/l$ , то для мінімальної енергії частинки з (4.20),

отримаємо:  $E_{\min} \sim \frac{\hbar^2}{2ml^2}$ , що за порядком величини узгоджується з виразом (4.20).

Розглянуті особливості поведінки частинок не спостерігаються в класичній механіці, навіть якщо йдеться про рух мікроскопічних частинок, наприклад, молекул газу в посудині. Чому це так, оцінимо найменшу можливу кінетичну енергію  $E_e$  та швидкість руху  $v_e$  електрона масою  $m \approx 10^{-30}$  кг в ящику ширини  $l = 10^{-10}$  м і молекули кисню  $O_2$  масою  $m \approx 5,3 \cdot 10^{-26}$  кг в посудині розміром  $l = 10$  см.

Для електрона маємо:

$$E_e = \frac{m v_e^2}{2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e l^2} = \frac{3,14^2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} = 6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}; E_e \approx 37 \text{ еВ},$$

та 
$$v_e = 3,6 \cdot 10^6 \text{ м/с} \cdot 10^{-10}$$

Такі значення є досить великими. Наприклад, величина  $E_e$ , 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  $E_{O_2} \approx 10^{-40}$  Дж і  $v_{O_2} \approx 6 \cdot 10^{-3}$  м/с.

Сказане стосується й дискретності енергетичного спектра. Для переведення електрона в ящику ширини  $10^{-10}$  м з першого на другий рівень необхідно надати йому енергію  $\sim 100$  еВ (в атомі Гідрогену  $\approx 10$  еВ). Ця величина відповідає енергії фотонів жорсткого ультрафіолетового випромінювання і в  $\sim 10^4$  разів перевищує середню енергію, якою обмінюються частинки внаслідок теплового руху. А для молекули  $O_2$  в посудині розміром  $l = 10^{-10}$  м треба всього  $\sim 10^{-21}$  еВ, тобто, ні про яку дискретність рівнів говорити не доводиться.

**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 відношенні поводить інакше.

Згідно з (4.18), густина ймовірності перебування частинки в заданій точці ящика визначається функцією:

$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \left( \frac{\pi x}{l} n \right). \quad (4.21)$$

З (4.21) випливає, що для квантової частинки в ящику існують точки, в яких  $|\psi|^2 = 0$ . Положення таких точок задається умовою:

$$\frac{\pi x_i}{l} n = i\pi \Rightarrow x_i = i \frac{l}{n}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (4.22)$$

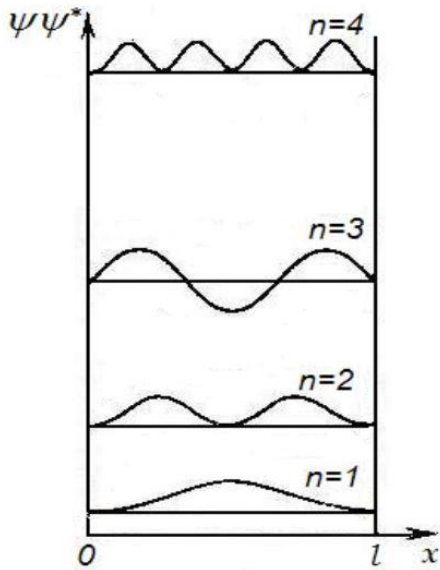


Рис. 1.11

Наявність точок відповідно (4.22) демонструє рисунок 1.11, на якому зображено графік 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 вздовж заданої траєкторії. Але її можна збагнути на основі хвильових уявлень. А саме: енергія частинки в ящику є чисто кінетичною:

$$E = \frac{p^2}{2m},$$

тож зробивши заміну у виразі (4.11), отримаємо:

$$k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow k = \pm \frac{p}{\hbar} = \pm \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (4.23)$$

де, відповідно до (2.10), – дебройлівська довжина хвилі частинки.

Це означає, що параметр  $k$  в рівнянні (4.14) є хвильовим числом дебройлівських хвиль, які разом із частинкою поширюються в ящику і відбиваються від його стінок.

Але теорія хвиль говорить, що між двома відбиваючими стінками можуть існувати лише хвилі із дискретними довжинами  $\lambda_n$ , при накладанні яких утворюються стаціонарні стоячі хвилі. При цьому на відстані між стінками має укладатися ціла кількість півхвиль:

$$l = n \frac{\lambda_n}{2} \Rightarrow \lambda_n = \frac{2l}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

І якщо підставити сюди співвідношення де Бройля (2.10), то для імпульсу частинки буде:

$$p_n = \frac{\pi \hbar}{l} n, \quad (4.24)$$

а для енергії:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (4.25)$$

Як бачимо, (4.25) збігається з виразом (4.19). Отже, *ефект квантування станів можна трактувати як наслідок утворення стоячих дебройлівських хвиль при відбиванні частинки від стінок ящика*. При цьому точки, в яких  $|\psi(x)|^2 = 0$ , є вузлами вказаних стоячих хвиль.

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

### 4.3. Частинка в тривимірному потенціальному ящику

*Квантові стани.* Розглянемо тепер випадок, коли частинка перебуває в тривимірному ящику з ребрами  $l_1, l_2, l_3$  (рис. 1.12) і може в ньому вільно рухатись у довільному напрямку. В цьому випадку її хвильова функція є функцією трьох змінних  $(x, y, z)$ , тож рівняння Шрьодінгера має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 \psi = 0, \quad (4.26)$$

де, відповідно до (4.11)  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ .

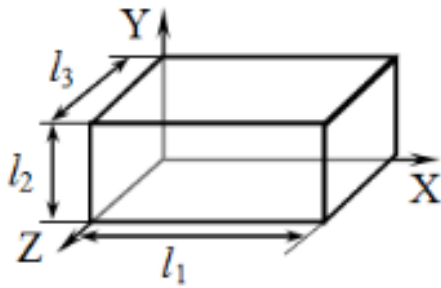


Рис. 1.12

Це рівняння легко розв'язується методом відокремлення 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 ймовірність того, що вона одночасно має задані значення всіх трьох координат, є складною подією. При цьому в теорії доводиться, що ймовірність складної події дорівнює добутку ймовірностей простих незалежних подій, з яких вона "складається". Це, враховуючи ймовірнісний зміст хвильової функції, дозволяє шукати розв'язки рівняння (4.21) у вигляді добутку "однокоординатних" функцій, кожна з яких визначає положення частинки тільки відносно однієї координатної осі:

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z). \quad (4.27)$$

Піставляючи (4.27) у рівняння (4.26), маємо:

$$\begin{aligned} \psi_2\psi_3 \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \psi_1\psi_3 \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + \psi_1\psi_2 \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} = -k^2 \psi_1\psi_2\psi_3 \Rightarrow \\ \frac{1}{\psi_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} = -k^2. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Отримана рівність (2.28) містить не числа, а функції  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(y)$ ,  $\psi_3(z)$  і має бути чинною при всіх значеннях змінних  $x, y, z$ . А це можливо лише за умови, що аналогічні рівності виконуються окремо для кожної із функцій:

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = -k_x^2; \quad \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} = -k_y^2; \quad \frac{1}{\psi_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} = -k_z^2,$$

або

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_x^2 \psi_1 = 0; \quad \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + k_y^2 \psi_2 = 0; \quad \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} + k_z^2 \psi_3 = 0. \quad (4.29)$$

При цьому відповідно до (4.28) параметри  $k_x, k_y, k_z$  повинні задовільнити умову:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 \quad (4.30)$$

Як бачимо, вихідне рівняння (4.26) трансформувалося в систему з трьох "однокоординатних" рівнянь (4.29), кожне з котрих є ідентичним рівнянню (4.10) з усіма наслідками. Зокрема, однокоординатні хвильові функції мають вигляд (4.18), відповідно до чого повні хвильові функції частинки в тривимірному ящику виражаються, як:

$$\Psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}} \sin\left(\frac{\pi x}{l_1} n_1\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi y}{l_2} n_2\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi z}{l_3} n_3\right). \quad (4.31)$$

Так само енергія частинки, згідно з (4.19) і (4.30), виражається, як:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2),$$

або, враховуючи вираз (4.16), як:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots \quad (4.32)$$

де квантові числа  $n_1, n_2, n_3$  не залежать одне від одного.

Вираз (4.32) є досить прозорим. Якщо в ньому розкрити дужки і врахувати співвідношення (4.24), то вийде:

$$E_n = \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

де  $p_x, p_y, p_z$  – проекції імпульсу частинки, а  $p$  – модуль її імпульсу.

Це висвітлює фізичний зміст проведеної при розв'язуванні рівняння (4.26) процедури відокремлення змінних. Вона по суті означає звичний для механіки поділ руху частинки в довільному напрямі на три складові рухи уздовж координатних осей. При цьому кожна однокоординатна хвильова функція  $\Psi_1$  або  $\Psi_2$  або  $\Psi_3$  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, в якому  $l_1 = l_2 = l_3 = l$  та енергетичні рівні (4.32) визначаються формулою:

$$E = E_0(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \quad (4.33)$$

Відповідно до (4.33) в табл. 1 подані енергії та квантові числа для декількох перших енергетичних рівнів частинки в кубічному ящику.

Таблиця 1

Рівень	Енергія	Квантові числа			Кратність $N$
		$n_1$	$n_2$	$n_3$	
1	$3E_0$	1	1	1	1
2	$6E_0$	2	1	1	3
		1	2	1	
		1	1	2	
3	$9E_0$	2	2	1	3
		1	2	2	
		2	1	1	
4	$11E_0$	3	1	1	3
		1	3	1	
		1	1	3	
5	$12E_0$	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 (4.31) та квантових станів частинки. Така ситуація є типовою для квантової механіки, причому:

*різні квантові стани, що відповідають одному енергетичному рівню, як і самі такі рівні, називаються виродженими.*

Відповідно,

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

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

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

комбінацій чисел  $n_1, n_2, n_3$  і проєкцій (4.24) 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 в будь-якому з нескінченної кількості напрямків. Тому в класичній механіці поняття виродження станів позбавлене змісту. Зауважимо також, що ефект виродження станів є типовим для квантових систем і відіграє істотну роль у різних квантових явищах.

## 4.4. Лінійний гармонічний осцилятор

### 4.4.1. Класичний осцилятор

У класичній механіці лінійним гармонічним осцилятором називають матеріальну точку, що здійснює вільні гармонічні коливання вздовж однієї осі (лінії), тобто, рухається за законом:

$$x = x_m \cos(\omega t + \varphi).$$

Цей рух здійснюється під дією сили:

$$F_x = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega^2 x_m \cos(\omega t + \varphi),$$

або

$$F_x = -kx, \quad k = m\omega^2. \quad (4.34)$$

Така сила є консервативною й утворює потенціальне поле  $U(x) = -\int F_x dx$ , яке визначається формулою:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}. \quad (4.35)$$

Функція (4.35) на графіку зображується параболою (рис. 1.13). Тому поле виду (4.35) називають параболічним або осциляторним полем.

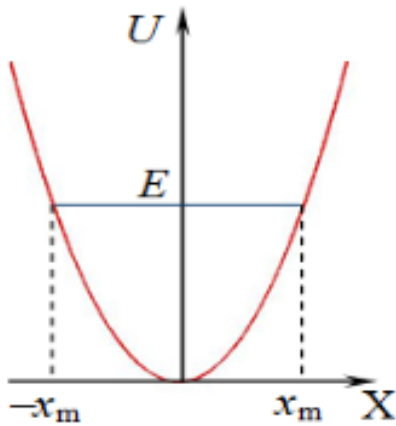


Рис. 1.13

Повна енергія осцилятора зберігається ( $E=const$ ) і на рисунку 1.13 зображується горизонтальним відрізком. Координати точок його перетину з параболою  $U(x)$  визначають амплітуду коливань осцилятора:  $A=x_m$ . При цьому повна енергія  $E$  і амплітуда  $A$  залежать тільки від початкових умов (початкового відхилення осцилятора від положення рівноваги або наданої йому початкової швидкості) і можуть бути якими завгодно.

Відповідно до виразу (4.34), частота осцилятора  $\omega$  визначається силовою константою поля  $k$  та масою осцилятора  $m$ :

$$\omega = \sqrt{k/m}. \quad (4.36)$$

Враховуючи (4.36), вираз потенціальної енергії осцилятора (4.35) можна переписати у вигляді:

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (4.37)$$

#### 4.4.2. Квантовий осцилятор. Енергетичний спектр.

Для мікрочастинок сила не є визначеною, тому в квантовій механіці лінійний гармонічний осцилятор означають як частинку, що знаходиться в параболічному силовому полі (4.37). Відповідно, рівняння Шрьодінгера (4.9) для лінійного осцилятора має вигляд:

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0.} \quad (4.38)$$

Розв'язування цього рівняння та його розв'язки хвильової функції квантового осцилятора є досить складними. Але й без строгого математичного дослідження можна передбачити, що стаціонарні стани квантового осцилятора є квантованими. Справді, при віддаленні від положення рівноваги потенціальна енергія осцилятора зростає необмежено, тож він ні за яких умов не може необмежено віддалитися від положення рівноваги  $x = 0$ . Отже, осцилятор можна розглядати як частинку в потенціальному ящику з параболічними стінками, тому його стани мають бути квантованими, як про це говорилося в п. 4.1.

Математика підтверджує такий прогноз: однозначні й неперервні розв'язки рівняння (4.38) хвильові функції осцилятора  $\Psi_\nu(x)$  існують лише при окремих значеннях параметра  $E$ , що утворюють дискретний енергетичний спектр осцилятора відповідно до умови:

$$E_\nu = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (4.39)$$

де  $\nu$  – квантове число осцилятора, або *коливальне квантове число*, а величина  $\omega = \sqrt{k/m}$ , за аналогією до класичного осцилятора називається *циклічною частотою квантового осцилятора*.

На рисунку 1.14,а показана картина енергетичних рівнів, яка ілюструє типові риси та деякі особливості енергетичного спектра квантового гармонічного осцилятора. Зокрема, вираз (4.39) показує, що осцилятор, як і частинка в прямокутному ящику, не може перебувати у стані спокою. Мінімальна енергія його коливань (енергія основного стану) дорівнює:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega. \quad (4.40)$$

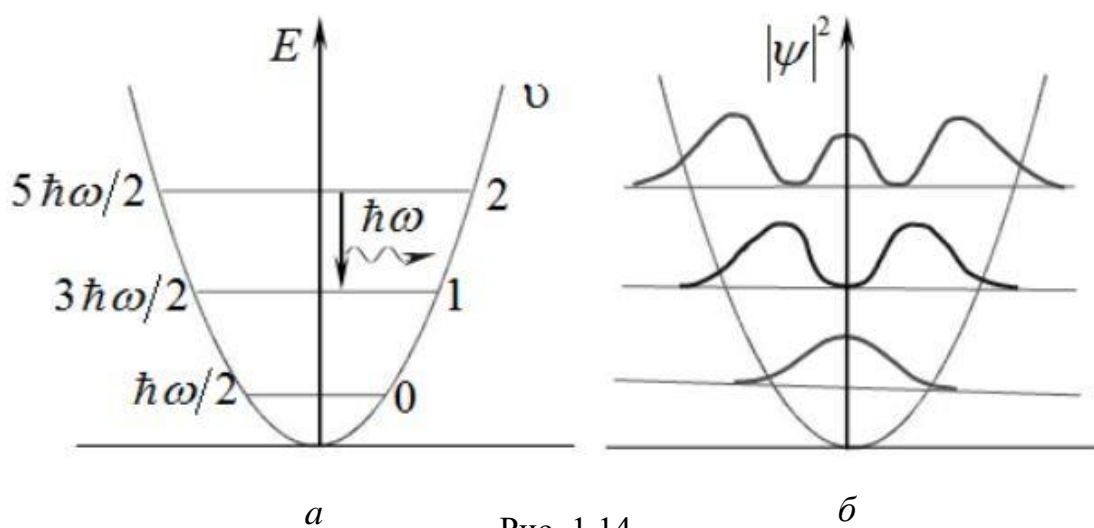


Рис. 1.14

Такими квантовими осциляторами є атоми в твердих тілах і рідинах, оскільки їхній тепловий рух являє собою малі коливання навколо положень рівноваги. Отже навіть при температурі  $T = 0$  К рух атомів не припиняється вони здійснюють так звані «нульові коливання» з енергією  $E_0$ . Але атоми не можуть передавати цю енергію один одному, тому квантові нульові коливання не мають нічого спільного з тепловим рухом атомів і не суперечать поняттю абсолютного нуля температури, так само як не суперечить йому рух електронів всередині атомів.

Енергетичні рівні збуджених станів осцилятора, які можна записати у вигляді (рис. 1.14,*a*):

$$E_v = E_0 + n\hbar\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

є еквідистантними (відстань між двома сусідніми рівнями є сталою величиною) та розташовані в енергетичній шкалі на однаковій відстані (рис. 1.14,*a*):

$$\Delta E = E_{v+1} - E_v = \hbar\omega. \quad (4.41)$$

Отже, *при переході гармонічного осцилятора з будь-якого енергетичного рівня на сусідній нижчий рівень згідно із законом збереження енергії, випромінюється порція (квант) енергії. Це пояснює квантову гіпотезу Планка та правило частот Бора.*

Теорія і дослід показують, що можливі тільки такі зміни стану осцилятора, при яких коливальне квантове число змінюється на одиницю:

$$\Delta v = \pm 1.$$

Згідно з цим "правилом відбору", можливі переходи лише між сусідніми енергетичними рівнями осцилятора, і згідно з (4.41), атоми твердого тіла мали б обмінюватися квантами енергії однієї єдиної частоти. Але насправді так відбувається тільки при дуже низьких температурах.

У загальному ж випадку в спектрах коливань атомів присутні цілі смуги близьких частот. Це пов'язано з ангармонізмом відхиленням взаємодії між атомами від гармонічного закону (4.35) при підвищених температурах. Слід зазначити, що величина квантів коливальної енергії набагато менша, ніж енергія, що випромінюється чи поглинаються при переходах електронів між рівнями в атомах. Тому частоти коливальних переходів атомів лежать у далекій інфрачервоній області спектра.

Атоми здійснюють коливання не тільки в конденсованій речовині, а і в окремих молекулах. Тож при зміні стану молекули відбувається не тільки перехід електронів в атомах з одних електронних рівнів на інші, а й перехід самих атомів із одних коливальних рівнів на інші. Через це при переходах електронів у молекулах між заданими двома рівнями випромінюються (чи поглинаються) фотони не з однією частотою, а з цілою низкою близьких частот, які відповідають переходам атомів між різними коливальними рівнями. Тому *молекулярні спектри є не лінійчатиими, як атомарні, а смугастими.*

Зазначимо, що експериментальні дослідження молекулярних спектрів не лише підтверджують квантову теорію осцилятора, а й дають цінну інформацію про взаємодію та розташування атомів у молекулах.

**Хвильові функції.** Із рівняння (4.38) можна отримати аналітичні вирази хвильових функцій гармонічного осцилятора  $\Psi_\nu(x)$ , і визначити розподіл ймовірностей  $|\Psi_\nu(x)|^2$  знаходження осцилятора в різних точках простору для різних квантових станів.

Для перших трьох станів ( $\nu = 0, 1, 2$ ) графіки  $|\Psi_\nu(x)|^2$  зображено на рисунку 1.14,б. Загалом вони нагадують аналогічні графіки (рис. 1.11) для частинки в ящику з вертикальними стінками. Зокрема, в області руху існують точки з максимальною імовірністю знаходження осцилятора та «заборонені точки», в яких осцилятор виявити неможливо.

Проте є й істотна відміна: графіки  $|\Psi_\nu(x)|^2$  виходять за межі графіка  $U(x)$ , що означає можливість перебування осцилятора в точках з координатами  $|x| > x_m$ .

У таких точках на графіку  $E < U$ , що дає для кінетичної енергії неможливі значення:

$$\frac{p^2}{2m} = E - U < 0.$$

Але цей парадокс є удаваним і пов'язаний із принципом невизначеності. Дійсно, кінетична енергія  $K$  визначається імпульсом, а потенціальна  $U$  координатами, тобто величинами, що одночасно на можуть бути точно визначеними (див. тема 2). Тому поділ повної енергії  $E = K + U$  на кінетичну та потенціальну є певною мірою умовним. При цьому, як доводять розрахунки, у "забороненій зоні" квантовомеханічна невизначеність кінетичної енергії осцилятора  $\Delta K$  ніде не перевищує «дефіцит»  $E - U$ . Тому можливість виходу осцилятора в класично заборонену зону  $|x| > x_m$  зовсім не означає від'ємність його кінетичної енергії.

## 4.5. Тунельний ефект

### 4.5.1. Бар'єри

Якщо на шляху частинки трапляється силове поле, що перешкоджає її рухові, то таке поле називають *потенціальним бар'єром*.

Наприклад, гірка на шляху кульки, що вільно рухається по горизонтальній поверхні (рис. 1.15, а), створює потенціальний бар'єр, показаний на рисунку 1.15, б графіком потенціальної енергії кульки  $U(x)$  в залежності від координати. Бар'єр характеризується висотою  $U_0$  (максимальною величиною потенціальної енергії) та шириною  $d$  (розміром області, в якій снує силове поле; зазвичай ця область не визначена точно, тому в кожному випадку зводять певну ефективну ширину бар'єра).

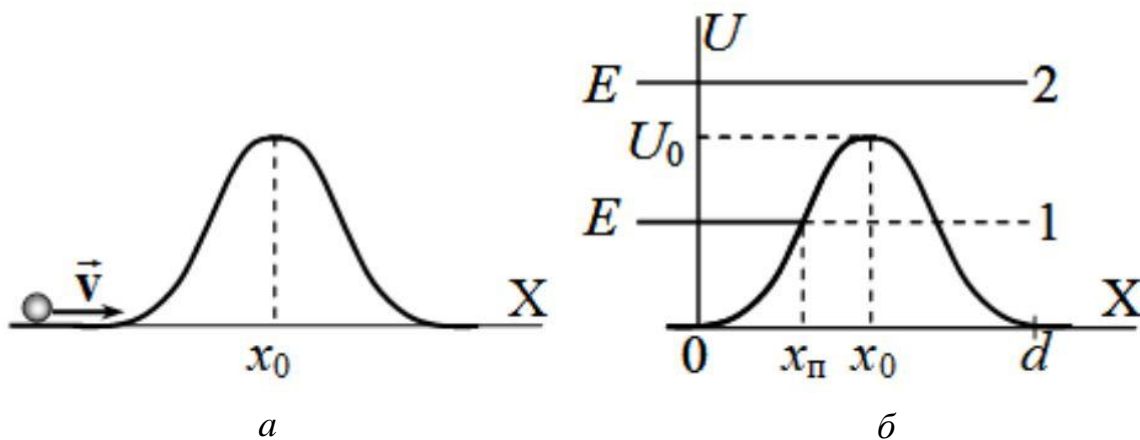


Рис. 1.15

При розгляді руху частинки в напрямку бар'єра виникає природне запитання: подолає вона бар'єр і буде продовжувати рух у тому ж напрямку, чи ні? Для класичної частинки відповідь є однозначною й залежить від співвідношення між повною енергією частинки та висотою бар'єра.

При русі частинки в потенціальному полі повна енергія, що складається з кінетичної та потенціальної, зберігається:  $E = K + U = \text{const}$ . Тому, якщо  $E < U$  (горизонтальна лінія 1 на рисунку 1.13б), то частинка «відіб'ється» від бар'єра, тобто дістанеться тільки точки  $x = x_1$ , де  $U = E$  і  $K = 0$ , і почне рухатись у зворотному напрямі.

Якщо ж  $E > U_0$ , (лінія 2 на рисунку 1.13б), то навіть при  $x = x_0$  (на вершині гірки) кінетична енергія кульки  $K = E - U_0 > 0$ . Тож при  $E > U$ , кулька обов'язково подолає бар'єр і продовжить рух далі. В окремому випадку  $E = U_0$ , в точці  $x = x_0$  кінетична енергія  $K = 0$ , тобто кулька дістанеться вершини і зупиниться. Отже, формально вона подолає бар'єр, бо не буде відкинута назад. Але рівновага кульки в точці максимуму потенціальної енергії (на вершині гірки) є нестійкою, і в дійсності вона

неконтрольовано скотиться в той чи інший бік. Тому цей випадок не має для нас інтересу.

Розглянемо тепер рух квантової частинки за наявності потенціального бар'єра. Для цього треба скласти та розв'язати рівняння Шр'єдінгера (4.9). Аби максимально спростити математику, розглянемо бар'єр у вигляді прямокутної сходинки (рис. 1.16). У такому ідеалізованому полі потенціальну енергію в усьому просторі неможливо виразити аналітично, тобто якоюсь однією функцією  $U(x)$ . Тому рух частинки до бар'єра (область 1,  $x < 0$  на рисунку 1.14) і в області бар'єра (область 2,  $x \geq 0$  на рисунку 1.14) описують окремими рівняннями (4.10):

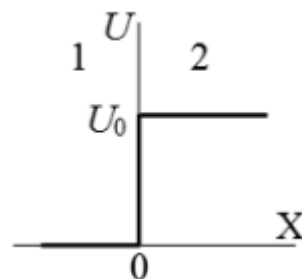


Рис. 1.16

$$\begin{aligned} \text{область 1: } \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0, k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \\ \text{область 2: } \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0, k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

При цьому, позаяк  $\psi_1(x)$  і  $\psi_2(x)$  є "половинками" хвильової функції тієї самої частинки, вони на межі областей ( $x = 0$ ) мають «зшиватися» гладко переходити одна в одну, тобто задовольняти умови:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \quad (4.43)$$

Із математики відомо, що загальні розв'язки рівнянь (4.42) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2 &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Фізичний зміст цих розв'язків стає зрозумілим, якщо записати повні вирази  $\psi(x, t)$  функцій (4.44) за формулою (4.8):

$$\psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)}. \quad (4.45)$$

Така функція (4.45) описує сукупність двох хвиль, які поширюються у протилежних напрямках осі  $X$ . Отже у виразах (4.44) перший доданок функції  $\psi_1$  відповідає рухові частинки у напрямку бар'єра, а другий її рухові у зворотньому напрямку після відбивання від стінки бар'єра. Так само перший доданок у  $\psi_2$  відповідає рухові частинки в області бар'єра після

подолання стінки. А от другого доданку в  $\Psi_2$ , себто зворотньої хвилі, не може бути, бо далі ніяких перешкод на шляху частинки немає. Тому  $B_2 = 0$  та:

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x}.$$

Суттєво також, що реально прослідкувати за окремою частинкою в потоці, що падає на бар'єр, неможливо. Можна говорити лише про коефіцієнти відбивання та проходження: відсотки частинок, які відбиваються від бар'єра та долають його. Ці коефіцієнти визначаються відносними амплітудами хвильових функцій:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1}.$$

Відтак розв'язки (4.44) можна подати у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}, \\ \Psi_2 &= a_2 e^{ik_2 x}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Наклавши на ці функції умови «зшивання» (4.43), визначимо відносні амплітуди:

$$\begin{aligned} 1 + b_1 &= a_2, \\ k_1(1 - b_1) &= k_2 a_2; \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (4.47)$$

Ці вирази дозволяють аналізувати поведінку потоку частинок, що налітають на бар'єр, у залежності від значень  $k_1$  і  $k_2$ , (4.42), тобто від енергії частинок  $E$  та висоти бар'єра  $U$ .

Зосередимося лише на випадку  $E < U_0$ . За такої умови величина  $k_2$  є уявною, і її доцільно записати як:

$$k_2 = ik, \quad \text{де} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad i = \sqrt{-1}. \quad (4.48)$$

Тоді амплітуда  $b_1$  у виразах (4.47) дорівнює: 
$$b_1 = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik}.$$

При цьому ймовірність відбивання:

$$\left| b_1 e^{-ik_1 x} \right|^2 = b_1 e^{-ik_1 x} \cdot b_1^* e^{ik_1 x} = b_1 b_1^* = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \cdot \frac{k_1 + ik}{k_1 - ik} = 1,$$

тож всі частинки, що налітають на бар'єр, відбиваються від нього.

Оскільки  $E < U_0$ , такий результат є цілком очікуваним. Але при цьому, згідно з виразами (4.46) і (4.48):

$$\Psi_2 = a_2 e^{-kx}, \quad \text{де } k - \text{дійсне число.}$$

Тому:

$$|\Psi_2|^2 = |a_2|^2 \cdot e^{-2kx} \neq 0. \quad (4.49)$$

Це означає, що існує ймовірність проникнення частинки в заборонену в класичній механіці область “під бар’єром”, де кінетична енергія  $K = E - U_0 < 0$ . Пояснення цього суто квантового феномена таке саме, як і у випадку квантового осцилятора (див. тема. 4, п.3).

#### **4.5.2. Тунельний ефект.**

Як впливає з (4.49), ймовірність заглиблення частинки під бар’єр стрімко спадає із збільшенням відстані  $x$ . Тому частинки, після подолання стінки заглиблюються в область бар’єра тільки на дуже малу відстань і повертаються назад. При цьому глибина заглиблення тим більша, чим менша величина  $k$  (4.49), тобто чим більша початкова кінетична енергія  $K_0 = E$  (і швидкість) частинки. Описана поведінка квантової частинки зовні нагадує відбивання від поверхні води легкої кульки, що падає з деякої висоти: вона спочатку занурюється на певну глибину, а потім вискакує назад. При цьому глибина занурення зростає при збільшенні швидкості входження кульки у воду. Якщо на шляху частинки трапляється бар’єр скінченної, причому дуже малої ширини  $d$ , існує помітна ймовірність того, що вона заглибиться в область бар’єра на відстань  $x = d$ . В такому разі частинка подолає бар’єр і зможе рухатися далі, хоча при  $E < U_0$  її енергія для цього формально є недостатньою.

*Пройходження частинок крізь бар’єр при енергії, меншій за його висоту, називається тунельним проходженням або тунельним ефектом.*

Ймовірність тунельного проходження, інакше - прозорість бар’єра  $D$ , є пропорційною ймовірності проникнення частинки під бар’єр на відстань  $x = d$  і для прямокутного бар’єра (рис. 1.17, а) наближено виражається формулою:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot d} \quad (4.50)$$

У випадку бар’єра довільної заданої форми  $U = U(x)$  (рис. 1.17, б) прозорість виражається як:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} \cdot dx} \quad (4.51)$$

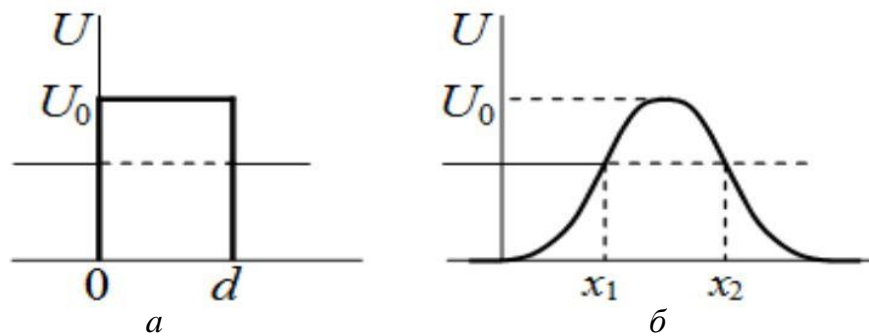


Рис. 1.17

З наведених формул видно, що ймовірність тунелювання є дуже чутливою до маси частинки та характеристик бар'єра, зокрема, ширини. Наприклад, для електронів при ефективній висоті прямокутного бар'єра  $U_0 - E = 1,0$  В розрахунки за формулою (4.50) для різної ширини  $d$  дають:

Отже, прозорість бар'єра є помітною лише при гранично малій його ширині, і може здатися, що на практиці спостерігати тунельний ефект

$d, \text{нм}$	0,2	0,5	1,0	2,0
$D$	0,135	0,007	$4,5 \cdot 10^{-5}$	$2,1 \cdot 10^{-10}$

неможливо. Але це не так. *Достатньо вузькі й помірно високі бар'єри створюються для валентних електронів ядрами атомів у твердих тілах.* При цьому через велику концентрацію електронів ( $\sim 10^{23} \text{ м}^{-3}$ ), навіть при дуже малій прозорості бар'єрів відбувається велика кількість тунельних переходів. Це зумовлює низку характерних тунельних явищ, які не лише спостерігаються в експерименті, а й використовуються на практиці.

## Контрольні запитання до лекції 4

1. Запишіть загальне рівняння Шредінгера та поясніть його фізичний зміст.
2. Яке фізичне значення хвильової функції у квантовій механіці?
3. Що означає розв'язок рівняння Шредінгера для частинки в одновимірному потенціальному ящику?
4. Як енергетичні рівні частинки в потенціальному ящику відрізняються від класичних уявлень?
5. Чому гармонічний осцилятор є важливою моделлю в квантовій механіці?
6. Запишіть рівняння власних енергій для квантового гармонічного осцилятора та поясніть їхній фізичний зміст.
7. Що таке тунельний ефект, і як він впливає з рівняння Шредінгера?

# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## Лекція 5

**Квантова теорія атома гідрогену та гідрогеноподібних атомів. Квантові числа. Інтерпретація квантування моменту імпульсу. Виродження енергетичних рівнів. Розподіл електронної густини в атомі гідрогену. Орбітальний магнітний момент електрона**

### 5.1. Квантові числа

Гідроген є визначним елементом у багатьох відношеннях. Це найпростіший атом, що складається з протона та електрона. Атомарний гідроген складає 75% звичайної матерії Всесвіту (не враховуючи темну матерію). Теорія атома гідрогену Нільса Бора (1913 р.) була однією з основних віх становлення квантової механіки. Теоретичне описання спектра гідрогену слугувало мотивацією Ервіна Шрьодінгера до формулювання його квантової теорії (1926 р.). З огляду на квантову механіку, атом гідрогену (і подібні системи з двох протилежно заряджених частинок) був і лишається єдиним атомом, для якого існують аналітичні розв'язки.

Сила  $F$  на частинку з радіус-вектором  $\vec{r}$  відносно деякої фіксованої точки  $O$  є центральною, якщо  $F$  має напрямок вздовж або протилежно  $r$ . Якщо крім того величина сили  $F$  залежить лише від відстані  $r$ , тобто  $\vec{F} = F(\vec{r})$ , то така сила є консервативною (потенціальною), і з нею зв'язаний сферично симетричний потенціал (потенціальна енергія)  $U = U(\vec{r})$ . Прикладом таких сил є ядерна, гравітаційна та сила Кулона. Рух в сферично симетричному потенціалі природно аналізувати в сферичних координатах.

Відомо, що електрон в атомі гідрогену знаходиться в полі ядра (див. тема 2), яке є центральним, тому задачу руху електрона можна розглядати у сферичних координатах.

Потенціальна енергія кулонівської взаємодії електрона з ядром (протоном):

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e q_Y}{r} = -k \frac{e^2}{r}, \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad (5.1)$$

тоді радіальне рівняння (10.13) [2] такому разі буде:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right\} \chi(r) = E\chi(r), \quad (5.2)$$

де  $m$  – зведена маса електрона та протона. (Оскільки протон у  $\sim 2000$  разів важчий від електрона, то  $m = 0.9995m_e$ , так що з хорошою точністю  $m = m_e$ , і протон можна вважати нерухомим.)

У випадку гідрогеноподібних іонів з атомним номером  $Z$  (He<sup>+</sup>, Li<sup>++</sup> тощо), потенціальна енергія у  $Z$  разів більша від (5.1), так що остаточні результати для таких систем отримаємо з водневих заміною  $e \rightarrow e\sqrt{Z}$ .

Перейдемо до безрозмірних величин для радіусу та енергії:

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad \epsilon = \frac{E}{E_1}, \quad (5.3)$$

де (2.5а):

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,5 \text{ \AA} - \text{радіус Бора}, \quad (5.4)$$

та енергія основного стану в моделі Бора:

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \approx -13,6 \text{ eV} \quad (5.5)$$

Зі змінними (5.3) рівняння (5.2) набуває вигляду:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\rho} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2 \rho^2} \right\} \chi(\rho) = E\chi(\rho),$$

або

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2ma}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} \chi(\rho) = \frac{E}{\hbar^2/2ma^2} \chi(\rho),$$

або

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} \chi(\rho) = \epsilon \chi(\rho). \quad (5.6)$$

Відповідно до (10.17) [2], розв'язки слід шукати у вигляді:

$$\chi(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho\sqrt{\varepsilon}} f(\rho), \quad (5.7)$$

де

$$\sqrt{\varepsilon} = ak = a\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{E}{\hbar^2 / 2ma^2}}.$$

Підставляючи (5.7) в (5.6), отримуємо:

$$x \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + (k+1-x) \frac{df(x)}{dx} + Nf(x) = 0, \quad (5.8)$$

де

$$x = 2\rho\sqrt{\varepsilon}, \quad (5.9)$$

$$k = 2l + 1, \quad (5.10)$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - (l+1). \quad (5.11)$$

Рівняння (5.8) – це рівняння Лагерра (Edmond Laguerre), розв'язками якого є приєднані поліноми Лагерра  $L_N^k(X)$  (G.Arffken, H.Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier (2005)). (Стандартна індексація для поліномів Лагерра є  $L_n^k$ . Ми змушені її уникнути, аби не виникало конфліктів з іншими змістами  $k$  та  $n$ ). Поліноми Лагерра зручно визначаються різновидом формули Родрігеса:

$$L_N^k(X) = \frac{e^X X^{-k}}{N!} \frac{d^N}{dX^N} (e^{-X} X^{N+k}). \quad (5.12)$$

Рівняння Лагерра (5.8) має розв'язки лише для цілих невід'ємних  $N$ , тобто:

$$N = 0, 1, 2, \dots \quad (5.13)$$

Позначимо:

$$n = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} = N + l + 1. \quad (5.14)$$

З (5.11) та (5.13) зрозуміло, що  $n$  є цілим числом.

Оскільки  $1/\sqrt{\varepsilon} > 0$ , то:

$$\boxed{n = 1, 2, 3, \dots, \rightarrow \text{ГОЛОВНЕ КВАНТОВЕ ЧИСЛО.}} \quad (5.15)$$

З (5.14) бачимо, що для певного  $n$  максимальне значення  $l = n - 1$  досягається при  $N = 0$ .

Отже, *орбітальне квантове число*  $l$  може набувати значень:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.16)$$

З позначення (5.14),  $\varepsilon = 1/n^2$ , так що енергія може набувати лише певних дискретних значень в залежності від головного квантового числа  $n$ . Повертаючись через визначення (5.3) до розмірної енергії  $E$ , енергії стаціонарних станів атома гідрогену:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eB}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.17)$$

що й було отримано ще Бором в його квазікласичній моделі (тема 2).

*Отже, головне квантове число  $n$  визначає можливі значення енергії (енергетичний спектр) атома гідрогену.*

Зазначимо, що іони, котрі мають тільки один електрон (так звані гідрогеноподібні іони) відрізняються від атома гідрогену лише величиною заряду ядра:  $q_Y = Ze$ , де  $Z$  порядковий номер елемента в таблиці Менделєєва. Тому вони мають аналогічний енергетичний спектр, тоді з (5.17):

$$E_n = -\frac{k^2 m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (5.18)$$

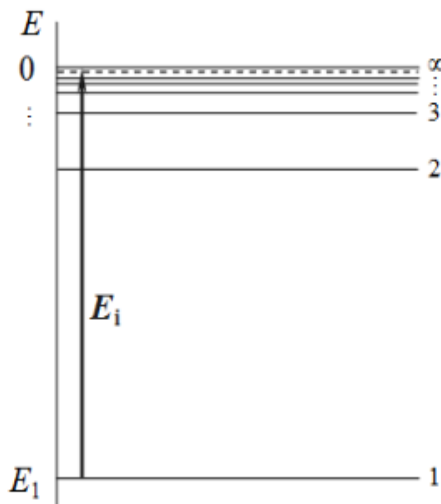


Рис. 1.18

Схема енергетичних рівнів атома гідрогену показана на рисунку 1.18.

Енергія основного рівня ( $n = 1$ ) складає  $E_1 = -13,6 \text{ eB}$  (5.17). Щоб іонізувати атом (відривати електрон від ядра), електрон необхідно перевести в стан з енергією  $E \geq 0$ .

Мінімальна необхідна для цього енергія, що називається енергією іонізації, дорівнює  $E_i = -E_1 = 13,6 \text{ B}$ . Це теоретичне значення збігається з величиною, знайденою дослідним шляхом.

Енергії стаціонарних станів не залежать від орбітального  $l$  та магнітного  $m$  квантових чисел, так що стани є виродженими.

Оскільки для кожного  $l$  можливі  $2l+1$  різних значень  $m$ , а  $l$  змінюється від 0 до  $n-1$ , то для даного  $n$  існують:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \text{ - станів з різними } l \text{ та } m,$$

так що кратність виродження станів дорівнює  $n^2$ , а основний стан  $n=1$  є не виродженим.

Поєднання (5.1) та (4.9) дає можливість записати рівняння Шрьодінгера для електрона у центральній-симетричному полі ядра:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.19)$$

Розглянемо графік залежності  $U(r)$  у будь-якій площині, що проходить через центр ядра (рис. 1.19) та зробимо деякі правдоподібні припущення щодо поведінки електрона, не розв'язуючи рівняння (5.19):

1. Якщо повна енергія електрона  $E < 0$ , (лінія 1 на рисунку 1.19) то при віддаленні від ядра на відстань  $r_0$  кінетична енергія електрона  $K = E - U$  поступово зменшується аж до нуля так, що він не може віддалитися від ядра значно далі, ніж на відстань  $r = r_0$ .

Отже, при  $E < 0$  електрон є зв'язаним із ядром, іншими словами, знаходиться в потенціальній ямі. Тому його стани мають бути квантованими.

2. При  $E \geq 0$  (лінія 2 на рисунку 1.19) електрон має достатню кінетичну енергію, аби віддалитися від ядра на необмежену відстань. Такі стани є не квантованими і відповідають іонізації атома.

Розв'язування рівняння Шрьодінгера для атома гідрогену підтверджує сказане: однозначні та неперервні і гладкі розв'язки рівняння (5.19) існують при будь-яких значеннях енергії  $E \geq 0$ , але лише при дискретних значеннях  $E = E_n$ , якщо  $E < 0$ .

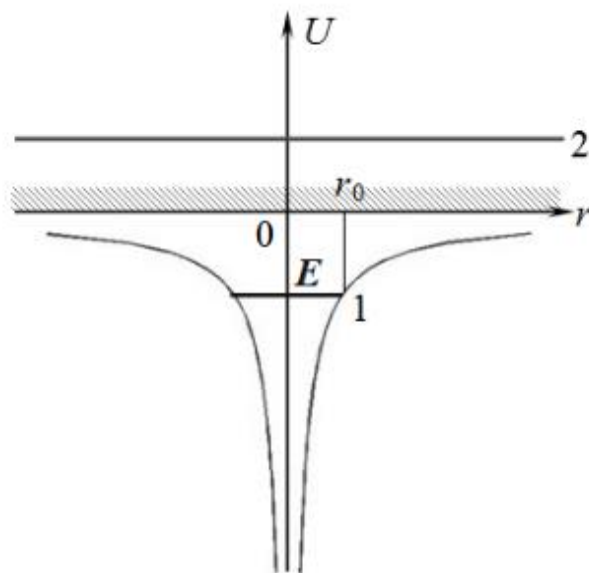


Рис. 1.19

Отже, не іонізований атом може перебувати тільки в деяких дозволених квантових станах. Застосування рівняння Шрьодінгера (5.19) дає такі результати:

*дозволеним станам відповідає дискретний набір хвильових функцій  $\psi(\vec{r}) = \psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$ , кожна з яких визначається трьома квантовими числами головним  $n$  (5.15), орбітальним  $l$  (5.16) та магнітним  $m_l$ .*

При цьому, позаяк рух електрона в полі ядра не є вільним, існує певна ієрархія квантових чисел:

головне квантове число  $n$  може набувати будь-яких значень. Натомість можливі значення  $l$  обмежені величиною  $n$ , а значення  $m_l$  - величиною  $l$ , відповідно до наступних умов:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots; \\ l &= 0, 1, 2, \dots, (n-1); \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \end{aligned} \quad (5.20)$$

При цьому, орбітальне квантове число  $l$  має всього  $n$  значень та, відповідно, магнітне квантове число  $m_l$  має всього  $(2l+1)$  значень.

## 5.2. Інтерпретація квантування моменту імпульсу.

### 5.2.1. Орбітальний момент імпульсу електрона

Рух класичної частинки замкненій траєкторії (орбіті) визначається вектором моменту імпульсу, що дорівнює векторному добутку радіуса-вектора частинки та вектора імпульсу:

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \equiv [\vec{r} \times m\vec{v}].$$

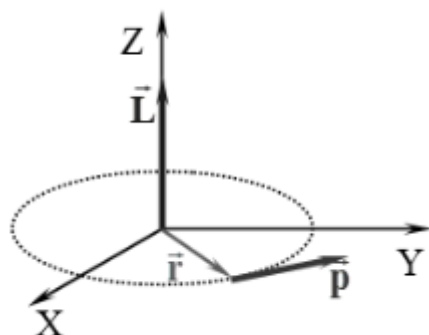


Рис. 1.20

Вектор  $\vec{L}$  напрямлений перпендикулярно до площини орбіти (рис. 1.20), тож *визначає її просторову орієнтацію.*

Рух електрона в атомі навколо ядра (орбітальний рух) теж є замкненим і характеризується *орбітальним моментом імпульсу.*

При цьому з рівняння Шрьодінгера (5.19) випливає, що орбітальний момент імпульсу електрона в атомі, як і енергія, квантується:

$$L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n-1). \quad (5.21)$$

Зауважимо, що поширені вирази «орбітальний рух» і «орбітальний момент» не слід сприймати буквально, позаяк *електрон в атомі не має визначеної траєкторії руху, тобто орбіти.*

### 5.2.2. Просторове квантування

Розв'язки рівняння Шрьодінгера показують, що не тільки модуль, а й *проекція моменту імпульсу  $L_z$  є квантованою.* При цьому можливі значення  $L_z$  задаються магнітним квантовим числом  $m_l$  (5.20), відповідно до умови квантування проекції моменту імпульсу:

$$L_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (5.22)$$

Квантування проекції означає, що вектор моменту імпульсу  $\vec{L}$  може бути напрямленим тільки під такими кутами  $\vartheta$  до осі  $OZ$  (рис. 1.21), для яких:

$$\cos \vartheta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}. \quad (5.23)$$

Іншими словами можливими є не всі орієнтації вектора моменту імпульсу в просторі. Тому ефект квантування проекції моменту імпульсу називають *просторовим квантуванням.*

Із умови квантування проекції моменту імпульсу (5.22) випливає, що можливі орієнтації моменту імпульсу є симетричними відносно площини, перпендикулярної до осі просторового квантування  $OZ$  і їхня кількість дорівнює  $(2l+1)$ . Наприклад, при  $l = 1$ ,  $m_l = 0, \pm 1$ . При цьому проекція може мати тільки значення  $L_z = 0$  та  $L_z = \pm \hbar$ , які відповідають кутам  $\vartheta = 90^\circ, 45^\circ$  та  $135^\circ$  (рис. 1.21).

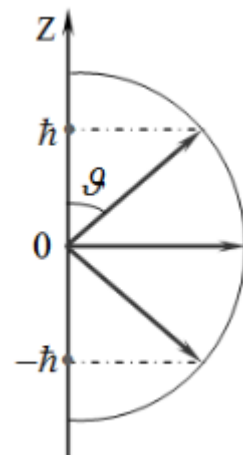


Рис. 1.21

Просторове квантування ставить два принципові запитання.

*Перше.* Відомо, що для однозначного визначення вектора у тривимірному просторі треба задати три числа, наприклад, проекції на три осі координат, або модуль і проекції на дві осі. Натомість умови квантування (5.21) і (5.22) дають тільки дві величини  $\vec{L}$  і  $L_z$ , і відтак визначають не один, а нескінченну множину векторів  $\vec{L}$ , напрямлених під заданим кутом  $\vartheta$  до

осі OZ. Тому може здатися, що рівняння Шрьодінгера не дає всіх відомостей про орбітальний момент імпульсу електрона в атомі. Але через принцип невизначеності повніша інформація є принципово недоступною.

Дійсно, уявімо що напрям вектора  $\vec{L}$  відомий точно, як у випадку класичної частинки (рис. 1.20). Тоді, спрямувавши координатну вісь OZ уздовж  $\vec{L}$ , можна було би стверджувати, що імпульс електрона перпендикулярний до осі OZ і траєкторія лежить у площині XOY. В такому разі координата Z і проекція імпульсу  $p_z$  в будь-який момент часу мали би точні значення  $Z = 0$ ,  $p_z = 0$ , що суперечить принципу невизначеності (3.1).

Маємо зробити наступний висновок:

*момент імпульсу мікрочастинки принципово не може мати однозначно заданого напрямку.*

Друге питання стосується напрямку осі OZ, відносно якої відбувається просторове квантування. Позаяк вільний простір є ізотропним, то всі напрямки в ньому рівноправні, і координатну вісь OZ (вісь просторового квантування) можна спрямувати, як забажається. Відтак напрошується парадоксальна думка, що напрямки вектора  $\vec{L}$  електрона залежить від нашого бажання. Але ніякого парадоксу насправді немає, бо запитання про напрям моменту імпульсу електрона априорі є беззмістовним.

Аби взнати, яким є вектор  $\vec{L}$ , треба провести відповідні вимірювання, тобто здійснити контрольований вплив на атом і зареєструвати реакцію (відгук) атома на цей вплив, у чому й полягає сутність процесу вимірювання як такого. Вказаний вплив здійснює силове поле, що створюється вимірювальним приладом або установкою в процесі вимірювання. Але в такому разі в просторі з'являється фізично виділений напрямок  $\rightarrow$  напрям створеного в приладі силового поля. Саме відносно цього виділеного напрямку і відбувається просторове квантування.

Важливим висновком з усього сказаного є те, що умови (5.21), (5.22) є універсальними не лише для орбітального моменту імпульсу електрона в атомі гідрогену, а й для моменту імпульсу будь-якого іншого походження.

*Тож момент імпульсу за самою природою є дискретною (квантованою) фізичною величиною, так, як, скажімо, електричний заряд.*

При цьому:

*стала Планка  $\hbar$ , подібно до елементарного заряду  $e$ , виступає як природня міра (квант) моменту імпульсу.*

Але через гранично малу величину  $\hbar$  дискретність моменту імпульсу є суттєвою лише для елементарних частинок.

### 5.3. Виродження енергетичних рівнів

#### 5.3.1. Кратність виродження рівня

Згідно з формулою (5.17), енергія електрона в атомі гідрогену залежить тільки від головного квантового числа  $n$ . Натомість хвильові функції, тож і квантові стани, визначаються ще й орбітальним  $l$  і магнітним  $m_l$  числами, котрі за умовами (5.20) при заданому  $n$  можуть мати декілька різних значень. Тому *квантові стани та енергетичні рівні електрона в атомі гідрогену є виродженими*. Виняток становить основний рівень, якому відповідає єдиний квантовий стан ( $n = 1, l = 0, m = 0$ ).

Підрозуміємо кратність виродження  $N$  енергетичних рівнів у атомі Гідрогену. Згідно із (5.21) і (5.22), кожному можливому значенню модуля моменту імпульсу електрона  $\vec{L}$  і квантового числа  $l$  відповідає  $N_l = 2l+1$  квантових станів, які відрізняються значеннями  $L_z$ , тобто орієнтацією моменту імпульсу відносно осі квантування. Отже, *загальна кількість станів  $N$ , які відповідають заданому енергетичному рівню*, складає:

$$N = \sum_l N_l = \sum_0^{n-1} (2l+1). \quad (5.24)$$

Доданки в цій сумі (5.24) утворюють арифметичну прогресію з першим членом  $l$  і останнім  $2n - 1$ . Тому, згідно з відомою формулою суми арифметичної прогресії, виходить:

$$N = n^2. \quad (5.25)$$

Одразу зауважимо, що в дійсності кількість станів, які відповідають заданому значенню  $n$ , є вдвічі більшою:

$$N = 2n^2. \quad (5.26)$$

Це пов'язано з існуванням у електрона *власного моменту імпульсу - спіну* (див. далі тема б), *чого не враховує рівняння Шрьодінгера*.

Для позначення вироджених станів електрона в атомі використовують спеціальну символіку, в якій відображають головне квантове число  $n$  та

орбітальне квантове число  $l$ , причому головне – цифрою, а орбітальне – латинською літерою за такою схемою для  $l$ :

$l$	0	1	2	3	4	5
Символ	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$

Згідно з цією схемою, основний стан електрона в атомі водню ( $n = 1, l = 0$ ) позначається як  $1s$ , стан з  $n = 2, l = 1$  – як  $2p$ , стан з  $n = 4, l = 2$  – як  $4d$  тощо.

### 5.3.2. Правила відбору

Як відмічалось раніше, при переході електрона з енергетичного рівня на нижчий випромінюється фотон відповідної енергії. Але *фотон, як і електрон, має власний момент імпульсу (спін), і відносить з атома не лише енергію, а й момент імпульсу.*

Тому при переході електрона в атомі з одного енергетичного рівня на інший можливі лише такі зміни його стану, що відповідають величині та можливим орієнтаціям моменту імпульсу випущеного фотона і узгоджуються із законом збереження моменту імпульсу. Через це електронні переходи в атомі задовольняють певним **правилам відбору – обмеженням на можливі зміни квантових чисел.** Для атома гідрогену вони такі:

$$\Delta l = \pm 1; \quad \Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (5.27)$$

Для головного квантового числа  $n$  ніяких обмежень не існує.

Завдяки правилам відбору можливі переходи тільки між «сусідніми» квантовими станами: із  $s$ -станів можливі переходи тільки в  $p$ -стани, із  $p$ -станів - тільки в  $s$  - або  $d$ - стани тощо. Через виродження рівнів правила відбору ніяк не впливають на частоти випромінювання вільних атомів гідрогену, але суттєво впливають на спектри багатоелектронних атомів і на поведінку атомів у магнітному та електричному полях.

## 5.4. Розподіл електронної густини в атомі гідрогену

У напівкласичній борівській теорії вважається, що електрони в атомах рухаються певними стаціонарними орбітами. Але, як вже не раз говорилося, таке уявлення не відповідає дійсності: просторова локалізація електронів у атомі визначається не траєкторіями, **а конфігурацією хвильових функцій**, або інакше – **орбіталями**.

Із рівняння Шрьодінгера (5.19) випливає, що хвильові функції електрона в атомі гідрогену визначаються квантовими числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , і є досить складними, тому не будемо їх виписувати та детально аналізувати. Нагадаємо, що:

- *головне квантове число  $n$  показує, як далеко від ядра може в середньому знаходитися електрон;*
- *числа  $l$  і  $m$  визначають геометричну конфігурацію області його локалізації.*

При цьому всі  $s$ -орбіталі ( $l = 0$ ) є сферично симетричними,  $p$ -орбіталі ( $l = 1$ ) нагадують «гантель», а для більш високих станів мають ще складнішу форму.

Залежність імовірності знаходження електрона на відстані  $r$  від ядра  $P_r(r)$  для  $s$ - та  $p$ -станів перших двох рівнів атома гідрогену показана на рисунку 1.22, де  $r_1$  – радіус першої борівської орбіти електрона в атомі водню.  $P_r(r)$

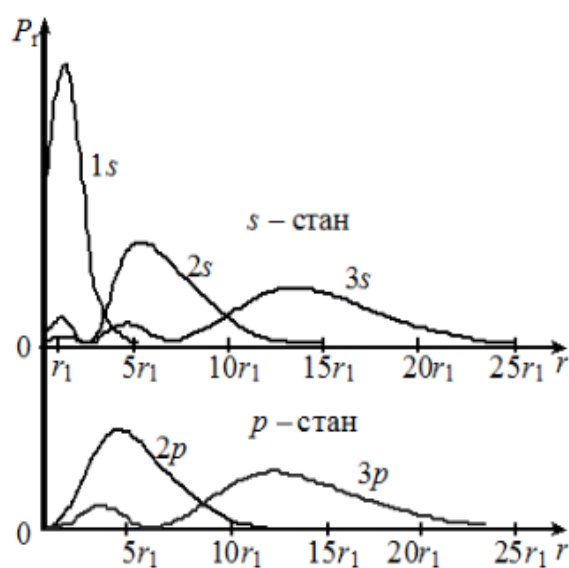


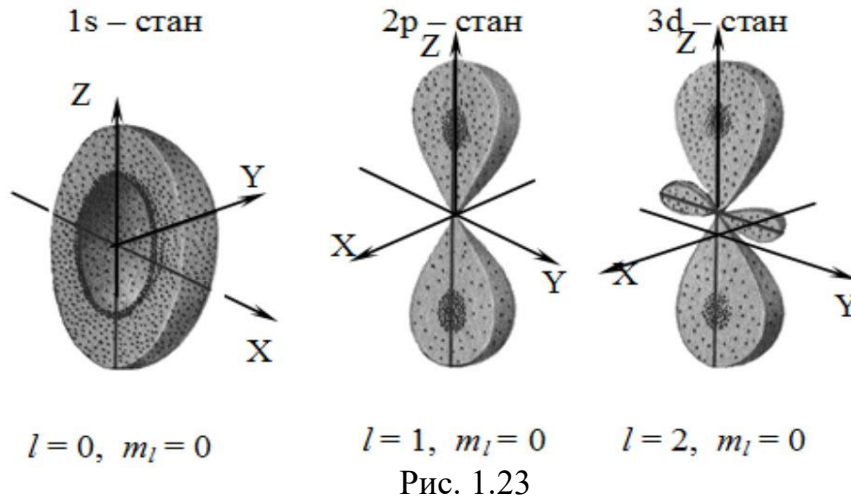
Рис. 1.22

З цього рисунка видно, що область можливого знаходження електрона, тож і розміри атома, не є чітко визначеними. За розміри атома  $r_a$  можна прийняти найбільш імовірну відстань електрона від ядра, тобто відстань, на якій величина  $P_r(r)$  є найбільшою.

У такому контексті цікаво, що в стані  $1s$  величина  $r_a$  дорівнює радіусу першої, а в стані  $2p$  - другої борівської орбіти, причому така відповідність зберігається й для інших станів з максимальним значенням орбітального числа  $l = n - 1$ .

Таким чином, рух електрона в атомі («орбітальний» рух) мало нагадує рух матеріальної точки вздовж траєкторії. При цьому, позаяк частота обертання електрона в атомі дуже велика ( $\sim 10^{16}$  Гц), ядро немов оповите неперервно розподіленим негативним зарядом, або «електронною хмариною».

Деяке уявлення про конфігурацію таких «хмаринок» дає рисунок 1.23.



## 5.5. Орбітальний магнітний момент електрона

Орбітальний рух електрона в атомі створює циркуляцію заряду навколо ядра, себто – деякий ефективний електричний струм і відповідне *орбітальне магнітне поле*. Із класичної електродинаміки відомо, що магнітні властивості малого витка зі струмом (магнітного диполя) визначаються магнітним моментом:

$$\vec{p}_m = IS\vec{n}, \quad (5.28)$$

де  $I$  – величина струму,  $S$  – площа витка,  $\vec{n}$  – орт (одичний вектор) нормалі до площини витка, пов'язаний з напрямом струму правилом правого гвинта.

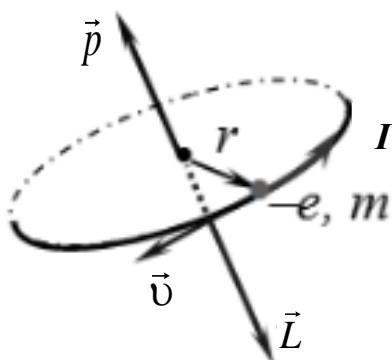


Рис. 1.24

Через невизначеність траєкторії класична формула (5.28) для знаходження *орбітального магнітного моменту* електрона в атомі, в принципі, є не коректною. Але квантово-механічний розрахунок дає такий самий результат. Тому можемо тимчасово розглядати електрон як матеріальну точку із масою  $m$  та від'ємним зарядом  $e$ , яка рухається із великою швидкістю вздовж колової траєкторії радіуса  $r$  й уподібнюється мікроскопічному витку площею  $S = \pi r^2$  з деяким струмом  $I$ , як показано на рисунку 1.24. Оскільки сила струму дорівнює кількості заряду, що

переноситься через дану поверхню за 1 с, то, уявивши на шляху електрона деяку площадку, знайдемо:

$$I = \frac{e}{T} = \frac{e v}{2\pi r},$$

де  $T$  – період обертання електрона навколо ядра;  $v$  – лінійна швидкість його руху.

Тоді із виразу (5.28) для модуля магнітного моменту отримаємо:

$$p = I \pi r^2 = \frac{e v r}{2}. \quad (5.29)$$

При русі частинки по колу момент імпульсу  $L = m v r$ , тож  $v r = L / m$ , і вираз (5.29) можна записати:

$$p = \frac{e}{2m} L,$$

або

$$p = g L, \quad (5.30)$$

де константа

$$\boxed{g = \frac{e}{2m}} \quad (5.31)$$

називається *орбітальним гіромагнітним співвідношенням*.

Оскільки заряд електрона від'ємний, напрям струму  $I$  є протилежним до напрямку руху електрона, тож вектори  $\vec{p}$  і  $\vec{L}$  є антипаралельними. Тому:

$$\vec{p} = -g \vec{L}, \quad (5.32)$$

$$p_z = -g L_z. \quad (5.33)$$

Орбітальний момент імпульсу електрона квантується за правилами (5.21) та (5.22), отже відповідно до (5.32) і (5.33) квантуються й модуль та проекція орбітального моменту електрона:

$$p = \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad (5.34)$$

$$p_z = -\mu_B m_l, \quad (5.35)$$

де величина:

$$\boxed{\mu_B = g \hbar = \frac{e \hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2} \quad (5.36)$$

називається *магнетоном Бора* і є природньою одиницею магнітного моменту електрона.

Подібна природня одиниця використовується і для визначення магнітних моментів ядерних нуклонів. Вона називається ядерним магнетоном  $\mu_Y$  і визначається через масу протона:

$$\mu_Y = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,05 \cdot 10^{-27} \text{ А} \cdot \text{м}^2 \quad (5.37)$$

Зауважимо, що через велику, порівняно з електроном, масу нуклонів  $\mu_Y \gg \mu_B$ , магнітні властивості атома визначаються головним чином магнетизмом електронів.

## **Контрольні запитання до лекції 5**

- Які основні ідеї квантової механіки лежать в основі теорії атома гідрогену?
- Які квантові числа використовуються для опису електрона в атомі, і що вони характеризують?
- Як інтерпретується квантування моменту імпульсу електрона в атомі гідрогену?
- Чому енергетичні рівні в атомі гідрогену є виродженими, і що це означає?
- Як змінюються енергетичні рівні при переході від атома гідрогену до гідрогеноподібних атомів ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$  тощо)?
- Що таке електронна густина, і як вона розподілена в атомі гідрогену?
- Які фізичні величини визначають форму та розмір атомних орбіталей?
- Як виникає орбітальний магнітний момент електрона, і як він пов'язаний із моментом імпульсу?
- Що таке магнітне квантове число, і яку роль воно відіграє у квантовій теорії атома?
- Як змінюється енергетична структура атома під впливом зовнішнього магнітного поля (ефект Зеемана)?

# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## Лекція 6

### Атом гідрогену у зовнішньому магнітному полі. Ефект Зеемана. Досліди Штерна – Герлаха та Айнштейна – де-Гааза. Спін електрона

#### 6.1. Атом гідрогену у зовнішньому магнітному полі. Ефект Зеемана

##### 6.6.1. Розщеплення енергетичних рівнів

З електродинаміки знаємо, що при внесенні витка зі струмом (магнітного диполя) у зовнішнє магнітне поле він отримує енергію:

$$W = -\vec{p}\vec{B} = -p_z B, \quad (6.1)$$

де  $\vec{B}$  – індукція магнітного поля;  $p_z$  – проекція магнітного моменту витка на напрям поля.

При внесенні в магнітне поле атома гідрогену, його електрон так само взаємодіє з цим полем, тоді згідно до умови квантування орбітального моменту (5.35), енергія взаємодії з полем буде:

$$W = \mu_A B m_l, \quad (6.2)$$

А енергетичні рівні атома  $E_n$ :

$$E_n = E_{n0} + \mu_A B m_l, \quad (6.3)$$

де  $E_{n0}$  – енергія рівня за відсутності поля.

На перший погляд може здатися, що відбувається просто зсув рівнів. Але через виродження ситуація є складнішою. Відповідно до умов (5.20), кожному рівню  $E_n$  відповідає  $n$  різних значень орбітального числа  $l$ , а кожному значенню  $l$  відповідає  $2l+1$  різних значень  $m_l$ . Оскільки максимальна кількість значень орбітального числа  $l_{\max} = n - 1$ , то повна кількість можливих значень  $m_l$  для заданого рівня складає  $2l_{\max} + 1 = 2n - 1$ . Тому кожен енергетичний рівень атома гідрогену  $E_{n0}$  у зовнішньому магнітному полі *розщеплюється* на  $2n - 1$  симетрично розташованих компонент з енергіями:  $E_{n0} \quad m_l \quad l_{\max}=n-1$

$$E_{n0}, E_{n0} \pm \mu_A B, E_{n0} \pm 2\mu_A B, \dots, E_{n0} \pm (n-1)\mu_A B. \quad (6.4)$$

Виняток становить основний рівень  $1s$  ( $l = 1$ ), на якому магнітний момент електрона  $p = 0$ , і його взаємодія з магнітним полем відсутня. В той самий час відстань між сусідніми компонентами будь-якого розщепленого енергетичного рівня атома однакова та визначається тільки величиною поля:

$$\Delta E_1 = \mu_A B. \quad (6.5)$$

Розглянемо діаграму розщеплення двох рівнів:  $n = 2$ , для якого кількість утворених компонент дорівнює 3, та  $n = 3$ , для якого кількість утворених компонент дорівнює 5 (рис. 1.25). За відсутності зовнішнього магнітного поля  $B = 0$  розщеплення буде відсутнє (рис. 1.25, а) у випадку наявності відмінного від нуля зовнішнього магнітного поля  $B \neq 0$  будуть існувати всі стани, що відповідають кожній компоненті розщепленого рівня (рис. 1.25, б). Позаяк треба відмітити, що в системі утворених рівнів найвищий і найнижчий є неvirодженими, а кратність virодження менша, ніж у вихідного рівня (рис. 1.25, б). Такий ефект називається **зняттям virодження** та спостерігається також у полях іншого походження і відіграє в квантових системах значну роль. Наприклад, при об'єднанні атомів у кристал утворюється так зване кристалічне поле, що призводить до зміни

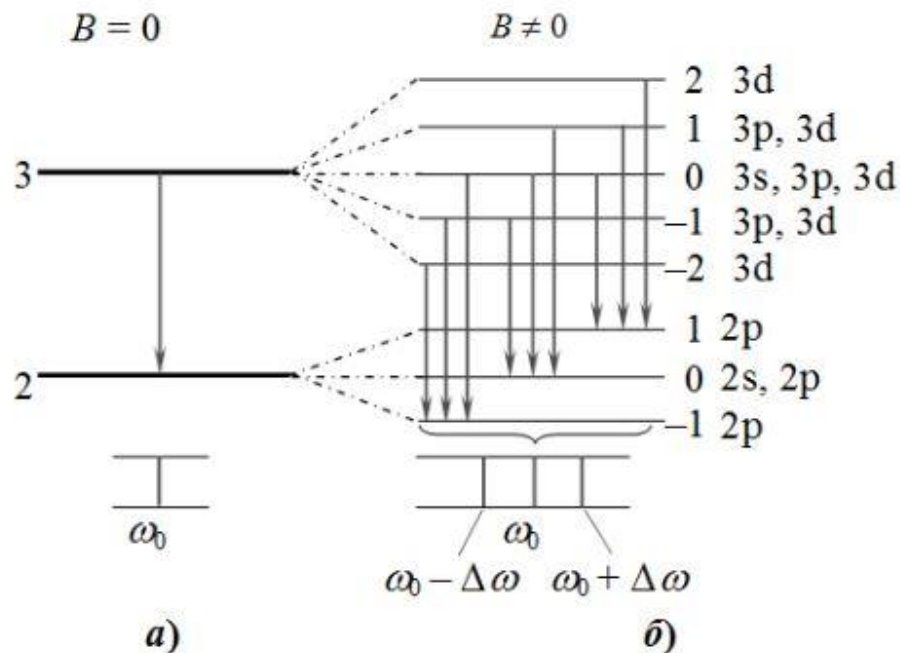


Рис. 1.25

положення енергетичних рівнів електронів у вільних атомах і утворення

енергетичних зон, поняття про які є основним у фізиці твердого тіла та фізиці напівпровідників.

### 6.1.2. Простий ефект Зеємана.

Розщеплення енергетичних рівнів автоматично призводить до відповідного розщеплення спектральних ліній атомів у зовнішньому магнітному полі – явища, яке називається *ефектом Зеємана*. Подібне явище має місце також в електричних полях і носить назву ефекта Штарка).

Розглянемо явище Зеємана для атома гідрогену на прикладі електронного переходу між енергетичними рівнями  $n = 3$  та  $n = 2$ , який схематично зображений на рисунку 1.25,а стрілкою.

Для вільних атомів такий перехід має одну спектральну лінію з частотою, відповідно до (2.1):

$$\omega_0 = \frac{E_{03} - E_{02}}{\hbar}. \quad (6.6)$$

Наразі, при потраплянні атома в магнітне поле енергетичні рівні розщеплюються (рис. 1.25, б). Внаслідок у спектрі замість однієї лінії з частотою  $\omega_0$  виникає декілька інших ліній, зумовлених переходами між окремими компонентами розщеплених рівнів. На перший погляд нових ліній має бути стільки, скільки є комбінацій компонент розщеплених рівнів. Але в дійсності їх набагато менше, що обумовлено правилами відбору (5.27), відповідно до яких можливі тільки три групи по три переходи, зображені на рисунку 1.25, б. Оскільки всі компоненти розщеплених рівнів розміщені на однаковій відстані (6.5), то випромінюються фотони всього з трьома різними енергіями:  $E_0$ ,  $E_0 - \Delta E$  та  $E_0 + \Delta E$ . Таким чином, при вміщенні у магнітне поле в спектрі випромінювання атома замість кожної спектральної лінії з частотою  $\omega_0$  має виникати три лінії із частотами:  $E_0$ ,  $E_0 - \Delta E$ ,  $E_0 + \Delta E$ ,

$$\omega_0 \text{ та } \omega = \omega_0 \pm \Delta\omega, \quad (6.7)$$

де, відповідно до (5.36) та (6.5):

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E_1}{\hbar} = gB. \quad (6.8)$$

Отже, в магнітному полі кожна поодинокі спектральна лінія («синглет») з частотою  $\omega_0$  має перетворюватись на «триплет», який складається із центральної лінії з частотою  $\omega_0$  та двох симетричних ліній,

частоти яких відрізняються від  $\omega_0$  на величину  $\Delta\omega$  (6.7), яка в свою чергу залежить тільки від індукції магнітного поля (6.8). Таке *розщеплення спектральних ліній спостерігається експериментально тільки в сильних полях* і за допомогою спектроскопа з високою роздільною здатністю є доволі незначним й *називається простим ефектом Зеемана*.

Зауважимо, що ефект Зеемана і є експериментальним підтвердженням просторового квантування моментів атомів.

### **6.1.3. Складний ефект Зеемана**

Простий ефект Зеемана, який є наслідком просторового квантування орбітального моменту електрона та правилом відбору для електронних переходів (при цьому ані кількість дозволених переходів, ані різниця їхніх енергій, тобто відстань між спектральними лініями (6.8), не залежать від величини магнітного моменту електрона, *мав би спостерігатись для всіх атомів*. Але він насправді є радше винятком, а не правилом.

Для більшості атомів спостерігається *складний ефект Зеемана: різні спектральні лінії мають різні величини розщеплення та кількість розщеплених компонент*. Тож, ефект Зеемана, з одного боку, підтверджує одне з принципів передбачень квантової механіки Шрьодінгера – просторове квантування, з іншого боку засвідчує, що магнетизм атома не можна пояснити лише орбітальним рухом електронів.

## **6.2. Досліди Штерна та Герлаха (1922 р.)**

Досліди продемонстрували квантування компонент (проекцій) моменту імпульсу. На початок 1920-х років стало зрозуміло, що теорія Бора атома водню (і її подальша версія, теорія Бора – Зоммерфельда) передбачала не тільки квантування енергії та орбітального моменту, але і напрямку останнього: траєкторія електрона атома гідрогену в магнітному полі мала бути перпендикулярною до поля, так що проекція моменту імпульсу на напрямок поля могла приймати лише одне з двох значень,  $\pm\hbar$ .

Це передбачення і надихнуло Отто Штерна, і невдовзі Вальтера Герлаха, на експериментальну його перевірку. Експерименти були підготовані та проведені Герлахом в Університеті Франкфурта в 1922 році, так що правильніше було б говорити “досліди Герлаха”, хоч Штерн також приймав участь.

В дослідах Герлаха струмінь атомів срібла, що створювався внаслідок розжарення у печі, у проходив через вузьку щілину, спрямовувався в область неоднорідного магнітного поля, створеного магнітом спеціальної форми, в подальшому атоми осаджувались на скляній пластинці-екрані (рис. 1.26).

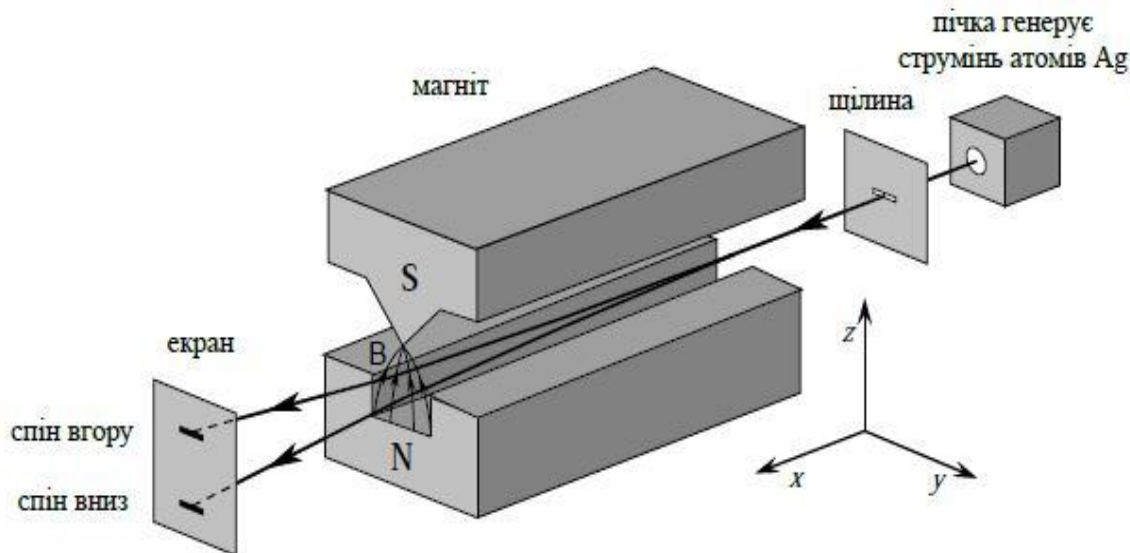


Рис. 1.26

За відсутності магнітного поля атоми рухались без відхилення та створювали вузьку смужку на екрані. При ввімкненні поперечного магнітного поля з індукцією  $\vec{B}$  через наявність у атомів магнітного моменту  $\vec{p}$  (5.30) на них здовж осі  $z$  діє сила:

$$F_z = p \frac{\partial B}{\partial z} \cos \vartheta = p_z \frac{\partial B}{\partial z}, \quad (6.9)$$

де  $\partial B / \partial z$  – градієнт поля;  $\vartheta$  – кут між напрямками векторів магнітного моменту  $\vec{p}$  та  $\vec{B}$ .

Під дією цієї сили атоми в пучку відхиляються від напрямку вльоту в поле і потрапляють в різні точки екрана залежно від величин та напрямку магнітного моменту. За довільної орієнтації магнітних моментів атомів пучка значення  $p_z$  лежали б у неперервному інтервалі  $[-p, p]$ , і на них діяли би всі можливі сили (6.9) теж у неперервному інтервалі значень  $[-p(\partial B / \partial z), p(\partial B / \partial z)]$ . Отже, на екрані мала б спостерігатись широка суцільна смуга.

Проте в дійсності *утворювалась система вузьких симетричних смужок*. Це вказувало на те, що можливі лише деякі значення  $p_z$ , а отже,

має місце просторове квантування магнітного моменту атома. Одночасно за правилами квантування моментів (5.21) та (5.34) кількість можливих значень  $p_z$ , тож і розщеплених компонент у пучку, мала би складати  $2l + 1$ , тобто бути непарною. *В дослідах же спостерігалось також розщеплення і на парну кількість компонент!* Зокрема це стосується срібла, гідрогену та інших атомів з одним валентним електроном, що знаходиться в  $s$ -стані ( $l = 0, m_l = 0$ ). Для таких елементів спостерігалось дві компоненти (рис. 1.25), хоча розщеплення взагалі не мало би бути.

Вже пізніше, такий результат знайшов пояснення. Атом срібла містить 47 електронів, сумарний орбітальний момент яких в основному стані атома дорівнює нулю. Спіни 46-ти електронів взаємно скомпенсовані (“спарені”), лишаючи один електрон з неспареним спіном. Таким чином, атом срібла виглядає як нейтральна частинка зі спіном  $1/2$ . *Між тим на час проведення дослідів існування спіну було невідоме, так що Штерн і Герлах вважали, що вони визначили орбітальний магнітний момент атома*, що виявився рівним одному магнетону Бора (5.36), цілком згідно з теорією Бора. Втім, природа поклала так, що спіновий момент електрона також дорівнює одному магнетону Бора.

### 6.3. Дослід Айнштайна – де-Гааза

Фізичне явище (магнітомеханічний ефект), при якому зміна магнітного моменту вільного тіла викликає обертання цього тіла був передбачений Оуеном Віллансом У. Річардсоном (1879-1959) у 1908 році. Цей ефект названий на честь Альберта Айнштайна та Вандера Йоханнеса де Гааза (1878-1960), які опублікували дві роботи у 1915 році, в яких сповіщали про перше експериментальне спостереження ефекту. Дослід мав на меті визначення гіромагнітного співвідношення (5.31) для ферромагнетиків у межах класичної теорії магнетизму речовини.

Розглянемо загальну схем та ідею дослідів. Ферромагнітний (залізний) циліндр підвішений за допомогою тонкої пружної нитки розміщений всередині циліндричної котушки (соленоїда), яка використовується для створення осьового магнітного поля, що намагнічує циліндр вздовж його осі (рис. 1.27).

Під дією змінного магнітного поля соленоїда циліндр перемагнічувався, тобто напрямки магнітних моментів окремих атомів і циліндра в цілому періодично змінювались. Відповідно зманювався і

напрямок моменту сил, що діяв на циліндр з боку поля. Через що він здійснював малі вимушені крутильні коливання.

Для підсилення ефекту частоту струму підбирали рівною резонансній частоті циліндра, так що амплітуду коливань можна було виміряти достатньо точно та за допомогою законів механіки можна знайти величину моменту імпульсу всього циліндра і навіть окремих атомів! Далі за допомогою законів електродинаміки через величину струму та магнітну проникність матеріалу циліндра можна визначити відповідні магнітні моменти.

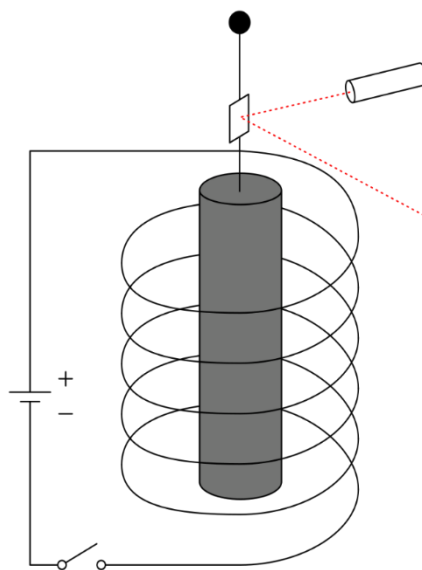


Рис. 1.27

Таким чином, знайдене у досліді *Айнштайна – де-Гааза* й відношення магнітного та механічного моментів атома – гіромагнітне співвідношення, величина якого виявилась з великою точністю рівною:

$$g_s = \frac{e}{m}. \quad (6.10)$$

В даному досліді гіромагнітне співвідношення (6.10) виявилось вдвічі більшим за очікуване значення (5.31), тому його назвали *аномальним гіромагнітним співвідношенням*. Зазначимо, що природу цього аномального гіромагнітного співвідношення не змогли пояснити ні класична фізика, ні квантова механіка, що ґрунтується на рівнянні Шрödінгера.

## 6.4. Спін електрона

На жаль, квантова механіка Шрödінгера, незважаючи на отриману завдяки їй інформацію про будову та властивості не лише атома гідрогену, а й складних атомів, молекул і конденсованої речовини, не давала пояснень щодо результатів дослідів Зеємана, Штерна – Герлаха та Айнштайна – де-Гааза.

У 1925 році американські фізики Самуель Аврам Гаудсміт (1902-1978) та Джордж Юджин Уленбек (1900-1988) висунули гіпотезу щодо існування у електрона власного моменту кількості руху. А у квантову механіку цю *фундаментальну характеристику – спін* увів у 1927 році Вольфганг Паулі (1900-1958).

Сама гіпотеза звучить так:

***електрон, незалежно від руху, має власний момент імпульсу – спін, та відповідний власний спіновий магнітний момент.***

Зазначимо, що слово «spin» перекладається як «веретено» або «дзига» було застосовано Ральфом Кронінгом, Гаудсмітом та Уленбеком у 1925 році через уявлення про обертання електрона навколо власної осі, яке виявилось, як з'ясувалось пізніше, помилковим.

Відповідно до умов квантування моменту імпульсу (5.21) (5.22), модуль і проекція спіну будуть визначатися:

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}; \quad (6.11)$$

$$L_{sz} = \hbar m_s, \quad (6.12)$$

де  $s$  – спінове квантове число;  $m_s$  – спінове магнітне квантове число.

Спробуємо отримати значення спінового квантового числа та спінового магнітного квантового числа із результатів дослідів Штерна та Герлаха. Ми знаємо, що основні фізичні та хімічні властивості атомів задаються валентними електронами. Отже, для атомів срібла (які застосовувались у досліді), що мають один валентний електрон у  $s$  – стані ( $l = 0$ ), орбітальний магнітний момент (5.35)  $p = 0$ , і ніякої взаємодії з магнітним полем не має бути. Тому можна покласти, що розщеплення пучків цих атомів у магнітному полі обумовлене власним магнітним моментом електрона – спіном.

Оскільки зв'язок між квантовими числами  $m_s$  та  $s$  такий самий, як між  $m_l$  та  $l$  (5.22), то загальна кількість можливих проекцій спіну на напрям магнітного поля має бути рівною  $2s + 1$ , а для атомів срібла (та їм подібним) спостерігається розщеплення пучка на дві компоненти, тому:

$$2s + 1 = 2 \Rightarrow \boxed{s = \frac{1}{2}}. \quad (6.13)$$

Результат: ***спінове квантове число (6.13) не є цілим і має єдине можливе значення!***

Тоді значення спінового магнітного квантового числа лежать в інтервалі  $[-s; s]$  та мають значення:

$$\boxed{m_s = \mp \frac{1}{2}}. \quad (6.14)$$

Відповідно до (6.11) та (6.12) *власний моменту імпульсу електрона та його можливі проєкції на відповідну вісь дорівнюють:*

$$\boxed{L_s = \hbar \frac{\sqrt{3}}{2}}, \quad \boxed{L_{sz} = \pm \frac{\hbar}{2}}. \quad (6.15)$$

Існування у електрона спіну призводить до того, що в атомі гідрогену (і не тільки) кожному набору квантових чисел  $(n, l, m)$  відповідає два квантових стани з (6.14)  $m_s = 1/2$  та  $m_s = -1/2$ , які відрізняються орієнтацією спіна. Ці орієнтації умовно називають «спін угору» та «спін униз» та позначають стрілками  $\uparrow$  і  $\downarrow$ .

Дослід Штерна та Герлаха, крім історичного значення, мав суттєве концептуальне значення в сенсі філософії квантової механіки.

По-перше, він показує, як створити, або як кажуть *підготувати визначений квантовий стан*: пропустити потік частинок через прилад Штерна – Герлаха, і тоді частинки, що відхилились вгору чи вниз, знаходяться у визначеному стані  $\uparrow$  або  $\downarrow$ .

По-друге, він демонструє *можливість певних квантових вимірювань*, тобто визначення квантового стану: пропустити потік частинок через прилад Штерна – Герлаха і проаналізуйте, відхилились вони вгору чи вниз. (Зверніть увагу, що це все ж не дає можливості визначити стан однієї частинки. Чому?)

Наявність спіну в електрона та його характеристики доводяться й іншими дослідними фактами. А саме: аномальна величина гіромагнітного співвідношення у феромагнетиках (6.10) в дослідах Айнштайна – де-Гааза пояснюється тим, що їхні магнітні властивості зумовлені саме спіновими моментами атомів, а визначена величина  $g_s = (e/m)$  і є *спіновим гіромагнітним співвідношенням для електрона*.

Отже, власний магнітний момент електрона буде:

$$\boxed{\vec{p}_s = -g_s \vec{L}_s}, \quad (6.16)$$

та відповідно до (6.10) s (6.15), має модуль і проєкції:

$$\boxed{p_s = \mu_B \sqrt{3}}, \quad \text{та} \quad \boxed{p_{sz} = \pm \mu_B}, \quad (6.17)$$

де  $\mu_B$  – магнетон Бора (5.36).

Таким чином, *магнетон Бора є природньою мірою не тільки орбітального, а й власного магнітного моменту електрона*.

#### **6.4.1. Природа спіну**

Як ми вже зазначали вище, спіну надавали поняття обертання електрона навколо власної осі, подібного до обертання планет. На жаль, така концепція себе не виправдала:

- величина власного моменту імпульсу електрона  $L_s$  (6.15) має єдине значення та не може змінюватись ні за яких умов. Це говорить про те, що *спін відображає не стан руху електрона, а його внутрішні властивості* (так само як заряд та маса);
- якщо б при обертанні навколо власної осі момент імпульсу кульки з розмірами і масою електрона мав значення (6.15), то лінійна швидкість точок її поверхні сягала б величини, більшої за швидкість світла у вакуумі ( $c = 3 \cdot 10^8$  м/с).

$$L_{sz} = m\omega r = \pm \frac{\hbar}{2} \Rightarrow$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2mr} = \frac{h}{4\pi mr} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{4 \times 3.14 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 10^{-17}} = 5.8 \times 10^{12} \text{ м/с}$$

Це пояснюється тим, що *квантова механіка Шрьодінгера не є релятивістською*.

Тоді як з релятивістського хвильового рівняння, яке отримав Поль Адрієн Моріс Дірак (1902-1984):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_D \psi,$$

де  $\hat{H}_D$  – гамільтоніан Дірака, існування спіну випливає автоматично! (пропонується самостійно ознайомитись Вакарчук, розділ 10). Тобто з цього рівняння слідує, що *хвильові функції електрона в атомі, окрім відомих квантових чисел  $n, l, m$  (5.20), визначаються ще одним квантовим числом із двома можливими значеннями  $\pm 1/2$ , тобто спіном*.

Остаточно можна стверджувати, що *спін є одночасно і квантовою і релятивістською властивістю частинки*.

Зазначимо, що спін є властивістю не лише електрона, а й інших частинок. Також є частинки як із пів цілим – електрон, протон, нейтрон, мюон, нейтрино та інші (рис. 1.28), так і з цілим значенням спіну – фотон, глюон та інші (рис. 1.28), та нульовим спіном – мезон, ядро гелію, атом гелію та інші.

**Три покоління матерії (ферміони)**

	I	II	III	
маса спокою→	2.4 MeV	1.27 GeV	171.2 GeV	0
електричний заряд→	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
спін→	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
назва→	<b>u</b> верхній	<b>c</b> зачарований	<b>t</b> істинний	<b><math>\gamma</math></b> фотон
	4.8 MeV	104 MeV	4.2 GeV	0
	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
Кварки	<b>d</b> нижній	<b>s</b> дивний	<b>b</b> чарівний	<b>g</b> глюон
	<2.2 eV	<0.17 MeV	<15.5 MeV	91.2 GeV
	0	0	0	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	<b><math>\nu_e</math></b> електронне нейтрино	<b><math>\nu_\mu</math></b> міонне нейтрино	<b><math>\nu_\tau</math></b> тау-нейтрино	<b><math>Z^0</math></b> Z-бозон
	0.511 MeV	105.7 MeV	1.777 GeV	80.4 GeV
	-1	-1	-1	$\pm 1$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
Лептони	<b>e</b> електрон	<b><math>\mu</math></b> міон	<b><math>\tau</math></b> тау	<b><math>W^\pm</math></b> W-бозон

Калібрувальні бозони (переносники взаємодії)

Рис. 1.28

### 6.4.2. Спін-орбітальна взаємодія

Як вже було зазначено вище (див. п.6.4) обидва квантові стани із «спіном угору» та «спіном униз» належать одному значенню головного квантового числа  $n$ , та інколи говорять, що наявність спіну призводить до подвоєння кратності виродження енергетичних рівнів (див. п. 5.3). Але в дійсності, вказані спінові стани мають не однакову енергію, тому таке твердження є не точним.

Така різниця енергій пояснюється там, що електрон зі спіновим магнітним моментом  $\vec{p}_s$  (6.16) перебуває в магнітному полі  $\vec{B}_0$ , яке створене орбітальним рухом електрона навколо ядра, та взаємодіє з цим полем (рис. 1.29, а). Спробуємо зрозуміти це, розглянувши рух відносно системи відліку, пов'язану з електроном (рис. 1.29, б), в якій протон (ядро атома гідрогену) рухається навколо електрона так само, як і електрон навколо ядра, тільки у протилежний бік.

Оскільки знак заряду протона протилежний до знаку заряду електрона, то магнітне поле, створюване ядром атома в системі відліку електрона за величиною та напрямком співпадає з полем  $\vec{B}_0$  (рис. 1.29, б).

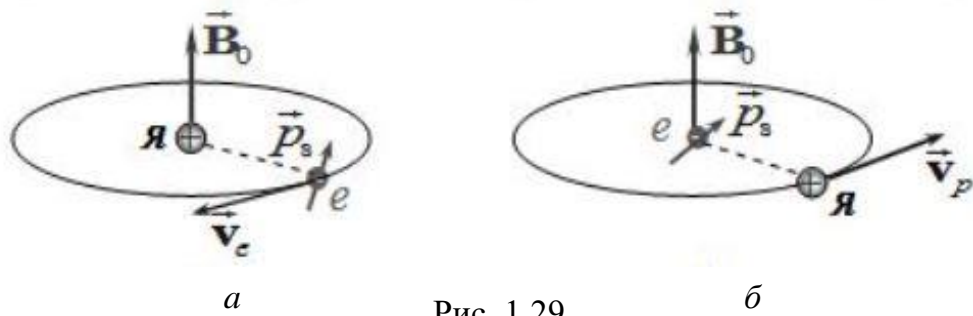


Рис. 1.29

Така *взаємодія спінового магнітного моменту електрона  $\vec{p}_s$  з орбітальним полем  $\vec{B}_0$*  і називається *спін-орбітальною взаємодією*. Саме за рахунок цієї взаємодії електрон, відповідно до (6.1) та (6.17) та орієнтації спіну отримує додаткову енергію:

$$W_{s0} = -\vec{p}_s \vec{B}_0 = \pm \mu_B B_0. \quad (6.18)$$

Відповідно, за заданого головного квантового числа  $n$  енергія електрона буде:

$$E_n = E_{n0} \pm \mu_B B_0, \quad (6.19)$$

де  $E_{n0}$  – енергія  $n$ -го рівня без урахування спіну та визначається формулою (5.18).

Отже, наслідком спін-орбітальної взаємодії в атомі гідрогену є те, що

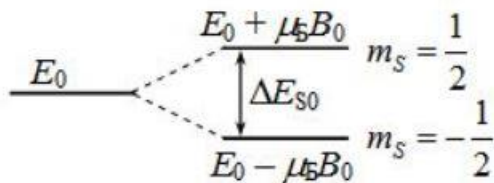


Рис. 1.30

кожен енергетичний рівень (крім основного) буде розщепленим на два підрівні (рис. 1.30), різниця (прийнято говорити відстань) між якими:

$$\Delta E_{s0} = 2\mu_B B_0. \quad (6.20)$$

Таким чином, дублетними (двократно розщепленими) виявляються й усі спектральні лінії атома гідрогену. Значення розщеплення (6.8) з урахуванням (5.36) та (6.20) буде:

$$\Delta\omega_{s0} = \frac{\Delta E_{s0}}{\hbar} = g_s B_0, \quad (6.21)$$

де –  $g_s$  спінове гіромагнітне співвідношення (3.10).

Дублетність спектральних ліній атомів лужних металів (наприклад срібла), які мають в основному стані один  $s$ -електрон також пояснюється спін-орбітальною взаємодією.

Так само пояснюється тонка структура спектрів у більш складних атомів, але наявність у них більше за один валентний електрон картина спін-орбітального розщеплення рівнів у таких атомах є набагато складнішою.

Зазначимо, що через велику швидкість орбітального руху та досить малі розміри електронних хмарин, орбітальні магнітні поля в атомах є дуже сильними і можуть сягати десятки Тесла. Тому спін-орбітальне розщеплення

спектральних ліній є більш значимим, ніж у зовнішніх магнітних полях (див. ефект Зеємана, п.6.1). Прикладом є найяскравіші лінії в спектрі атомів натрію (жовтий дублет), для яких спін-орбітальне розщеплення становить  $\Delta\lambda = 6 \cdot 10^{-10}$  м (рис. 1.31).

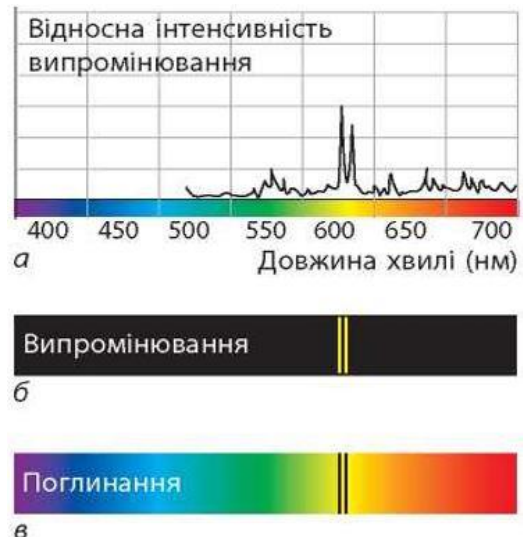


Рис. 1.31

## Контрольні запитання до лекції 6

1. Як змінюється спектр випромінювання атома гідрогену у зовнішньому магнітному полі?
2. У чому суть ефекту Зеємана, і які його основні різновиди?
3. Як класична фізика пояснювала ефект Зеємана, і чому знадобився квантовий підхід?
4. Яке значення має магнітне квантове число для розщеплення спектральних ліній у магнітному полі?
5. У чому суть експерименту Штерна – Герлаха, і яке фундаментальне відкриття він зробив?
6. Що таке спін електрона, і які докази його існування?
7. Як спін електрона впливає на квантові стани в атомі гідрогену?
8. Який фізичний зміст дослідів Айнштейна – де-Гааза, і яке явище він продемонстрував?
9. Як пов'язані між собою спін та магнітний момент електрона?
10. Як результати дослідів Штерна – Герлаха та Айнштейна – де-Гааза вплинули на розвиток квантової механіки?

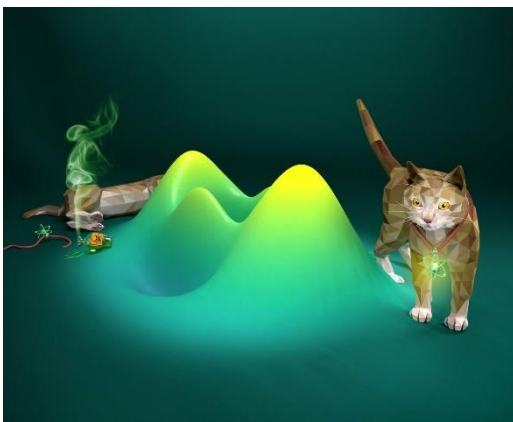
# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## Лекція 7

### Парадокси квантової механіки. Основи квантової інформації

#### 7.1. Парадокси квантової механіки

##### 7.1.1. Парадокс із котом Шрєдінгера



Парадокс, який запропонував Е. Шрєдінгер, полягає ось у чому. Всередині скриньки, стінки якої не пропускають ні світла, ні звуку, знаходиться кіт. У скриньці є отвір, що може бути відкритий на час, необхідний для пропускання одного фотона. На шляху фотона в скриньці є напівпосріблене дзеркало, що з імовірністю  $1/2$  відбиває фотон і з імовірністю  $1/2$  пропускає його. Якщо фотон проходить крізь дзеркало, то він приводить у дію пристрій (рушниця, ампула з синильною кислотою,...), який позбавляє бідлашного кота життя. Якщо фотон відбивається від дзеркала, то нічого не відбувається. Вважається, що фотон перебуває в суперпозиційному стані: “пройшов крізь дзеркало” та “відбився від дзеркала”. Відповідно до цього і кіт перебуває в суперпозиційному стані - між живим та мертвим, тобто маємо живомертвого кота:

$$|\text{стан кота}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\text{живий кіт}\rangle + |\text{мертвий кіт}\rangle \},$$

де замість  $\psi$  ми ввели дужки  $|\ \rangle$ , що позначають амплітуду стану.

Суть парадокса полягає в тому, що після потрапляння фотона в скриньку стан кота є недетермінованим\*, тобто таким, що принципово не має певного значення (живомертвий кіт). Виходить, що опис ситуації залежить від того, відкрили ми скриньку, щоб побачити стан кота, чи не

відкривали її. Насправді, недетермінованість і зникає саме в момент взаємодії фотона з пристроєм.

**\*Детерміновані системи** – системи, процеси в яких взаємозв'язані так, що можна відстежити ланцюг причин і наслідків. Детермінізм тісно зв'язаний із ступенем організації системи.

До детермінованих систем відносяться, наприклад, системи автоматичного керування, що складаються з елементів, у яких кожному значенню вхідних дій відповідають цілком певні значення вихідних змінних, швидкості і прискорення їх зміни. Такі елементи описуються в статичному режимі – алгеброю, а в динамічних режимах – диференціальними або інтегральними рівняннями. Протилежними відносно детермінованих систем є *стохастичні (ймовірнісні) системи*, в яких немає певного співвідношення між входами і виходами, а можна встановити тільки деякі співвідношення ймовірності між ними. Багато «складних систем», що складаються з великого числа детермінованих підсистем з випадковими зв'язками між ними, повинні бути віднесені до класу недетермінованих.

Простою детермінованою системою є система з невисокого числа елементів, яка має невелику кількість внутрішніх зв'язків та характеризується визначеною динамічною поведінкою. Будь – який логістичний процес при умовах, що він відповідним чином визначений, може відноситися до систем цього класу до того часу, поки не почнеться реальний процес. *Ця система стає імовірнісною, як тільки починається реальний процес.*

### **7.1.2. Парадокс де Бройля - Бома**

У деякому місті знаходиться закрита скринька. У ній є одна частинка, яка дзеркально відбивається від стінок. У скриньку вставляється перегородка також із дзеркально відбиваючими стінками, яка ділить її на дві рівні скриньки, що відокремлюються. Одну з них відправляють до іншого міста на значній відстані від першого, а другу залишають. У якій зі скриньок знаходиться частинка, повністю не детерміновано: це не означає, що частинка десь є, а нам просто невідомо де. Це означає, що не існує певного місця перебування частинки, тобто немає сенсу запитувати, де ж все-таки вона є. У другому місті ставиться експеримент з виявлення частинки.

Парадокс полягає в тому, що результат експерименту у другому місті миттєво впливає на ситуацію в першому місті, тобто детермінованість миттєво поширюється до першого міста (безвідносно до того, чи є про це

інформація в ньому, чи її там немає). Якщо аналізувати цю ситуацію з позиції класичної фізики, то частинка десь знаходиться, але нам невідомо де саме. Тобто стан частинки є детермінований і відкривання скриньки лише інформує нас про те, чи є вона у другому місті, чи немає. Квантова механіка стверджує повну недетермінованість стану частинки.

### **7.1.3. Парадокс Айнштейна – Подольського – Розена**

З метою довести, що квантова механіка дає неповний опис фізичних систем, А. Айнштейн (Albert Einstein), Б. Подольський (B. Podolsky ) і Н. Розен (N. Rosen) 1935 року опублікували статтю, в якій запропонували ситуацію, подібну до парадокса де Бройля. Зауважимо, що парадокс Шредингера з його живомертвим котом був реакцією на цю статтю.

Отже, нехай маємо дві частинки, відстань між якими дорівнює сталій величині  $x_0$ , а їхній повний імпульс дорівнює  $p$ . Величина  $x_0$ , може мати будь-яке значення. Таку систему частинок тепер називають *EPR-парою* (аббревіатура походить від перших літер прізвищ в англійській мові авторів парадокса).

Сам парадокс АПР стверджує, що *можна одночасно виміряти квантові характеристики* порушивши принцип невизначеності Гейзенберга, отже квантова механіка неповна.  
<https://habr.com/ru/articles/480672/>

Суть парадокса полягає в тому, що, вимірюючи імпульс однієї з частинок, ми ментально знаємо в той самий момент значення імпульсу другої частинки, “не торкаючись її”, якою значною не була б відстань між ними  $x_0$ . Таким чином, інформація поширюється зі швидкістю більшою, ніж швидкість світла (маємо суттєву нелокальність квантової теорії), і вимір величини для однієї з частинок впливає на детермінованість відповідних величин інших частинок.

Крім того, стверджують, що вимірювання координати та імпульсу, наприклад першої частинки, дає змогу отримати певні значення координати та імпульсу другої частинки, не вимірюючи їх безпосередньо. Тобто ці *величини існують одночасно, а це заборонено принципом невизначеностей Гайзенберга.*

Ми ще не раз будемо повертатись до цього *EPR*-парадокса, детальне вивчення якого врешті-решт привело до експериментальної реалізації так званої *квантової телепортації*.

## 7.2. Основи квантової інформації

*Квантова інформація* – це наука, яка вивчає способи збереження, переробки та передачі інформації з використанням квантових законів і явищ. Головним при цьому є використання так званих сплутаних квантових станів, коли, скажімо, в системі з двох частинок їхні одночастинкові стани є сильно скорельованими, як наприклад, спінові стани двох електронів у паргелії [Вакарчук]. Особливу увагу такі стани привернули до себе через так званий парадокс Айнштейна – Подольського – Розена (*EPR*), який ми розглянули вище (див. п.7.1.3)

### 7.2.1. Сплутані *EPR*-стани.

Поставимо завдання знайти хвильову функцію такої, як її називають, *EPR*-пари частинок у координатному зображенні. Для простоти розглянемо одновимірний випадок.

Отже, в одновимірному просторі потрібно знайти власну функцію операторів сумарного імпульсу системи двох частинок  $\hat{p} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$  та різниці їхніх координат  $\hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2$ , що описує *EPR*-пару в парадоксі Айнштейна – Подольського – Розена.

Оператори  $\hat{x}$  та  $\hat{p}$  комутовують між собою:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = [\hat{x}_1 - \hat{x}_2, \hat{p}_1 + \hat{p}_2] = [\hat{x}_1, \hat{p}_1] + [\hat{x}_1, \hat{p}_2] - [\hat{x}_2, \hat{p}_1] - [\hat{x}_2, \hat{p}_2] = \\ = i\hbar + 0 - 0 - i\hbar = 0. \quad (7.1)$$

Та мають спільну систему власних функцій:

$$\begin{aligned} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)\psi(x_1, x_2) &= x_{12}^0 \psi(x_1, x_2), \\ (\hat{p}_1 + \hat{p}_2)\psi(x_1, x_2) &= p_{12}^0 \psi(x_1, x_2), \end{aligned} \quad (7.2)$$

де  $x_{12}^0$  та  $p_{12}^0$  – неперервні власні значення фіксують можливі відстані між частинками та їхній повний імпульс.

Із першого рівняння бачимо, що  $\psi(x_1, x_2) \sim \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0)$ , а оскільки дія оператора  $\hat{p}$  на цю дельта-функцію дорівнює нулеві і з другого рівняння системи (7.2) випливає:

$$\psi(x_1, x_2) \sim e^{ip_{12}^0 x_2 / \hbar}$$

то загальний розв'язок такий:

$$\psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2) = C \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0) e^{ip_{12}^0 x_2 / \hbar}, \quad (7.3)$$

де  $C$  – стала нормування.

Підставляємо (7.3) в умову нормування:

$$\iint \Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2) \cdot \Psi_{x_{12}^{0'}, p_{12}^{0'}}^*(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \delta(x_{12}^{0'} - x_{12}^0) \cdot \delta(p_{12}^{0'} - p_{12}^0),$$

і знаходимо сталу  $C$ :

$$\begin{aligned} |C|^2 \int dx_1 \int dx_2 e^{i(p_{12}^0 - p_{12}^{0'})x_2/\hbar} \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0) \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^{0'}) = \\ = |C|^2 2\pi\hbar \delta(p_{12}^{0'} - p_{12}^0) \cdot \delta(x_{12}^{0'} - x_{12}^0). \end{aligned} \quad (7.4)$$

Отже, з (7.4) з точністю до фазового множника стала  $C$ :

$$C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}. \quad (7.5)$$

Остаточно з (7.3) та (7.5), хвильова функція  $EPR$ -сплутаної пари є такою:

$$\Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_{12}^0 x_2/\hbar} \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0). \quad (7.6)$$

Із точністю до сталого фазового множника цей вираз, завдяки  $\delta$ -функції і беручи до уваги, що  $p_{12}^0 = p_{21}^0$ , а  $x_{12}^0 = -x_{21}^0$ , можна записати і в явно симетричному вигляді.

Отже, ми отримали хвильову функцію, яка описує стан із точним значенням різниці координат та сумарного імпульсу частинок, однак ні координата, ні імпульс кожної з частинок не мають точного значення. Оскільки відхилення  $\Delta x_1 = \Delta x_2$ ,  $\Delta p_1 = -\Delta p_2$  ( $x_{12}^0$  та  $p_{12}^0$  є заданими), то співвідношення невизначеностей мають силу як для частинки, над якою проводять виміри, так і для частинки, якої “не торкаються” – це розв’язує  $EPR$ -парадокс. Як бачимо, наші *дві частинки є, і справді, сплутані між собою*.

Е. Шрєдингер придумав для таких хвильових функцій дуже популярну тепер назву “сплутані” стани (з німецької “Verschränkung”, а англійською це переклали як “Entanglement”). У наступному параграфі ми використаємо знайдену тут хвильову функцію  $EPR$ -пари (7.6) для побудови теорії явища квантової телепортації.

## 7.2.2. Квантова телепортація

[Ми розплутали квантову заплутаність? Все про квантові ефекти! \(youtube.com\)](https://www.youtube.com/watch?v=...)

У 1997 році в Інституті експериментальної фізики університету в Інсбруці (Австрія) була експериментально реалізована так звана квантова телепортація на фотонах. Під *телепортацією* розуміють *зникнення деякого об'єкта в одній точці простору і виникнення його в іншій* (телепортація: від грец. τηλε – далеко; від італ. porto, portare – носити, переводити, передавати).

Сама ідея була висловлена 1993 року, ґрунтується вона на парадоксі Айнштейна – Подольського – Розена (див. п.7.1.3). Автори ідеї у своїй першій роботі “працювали” з частинками, що мають спин  $\hbar/2$ , тобто з дискретними станами. Ці результати легко переформулювати на фотони, для яких також є два *можливі стани поляризації*. Тут ми обговоримо ідею квантової телепортації, використовуючи стани з неперервними змінними.

Розглянемо квантово-механічну систему, яка складається зі сплутаної *EPR*-пари двох частинок та невзаємодіючої з цією парою третьої частинки, що перебуває у стані  $\Psi$ . Хвильова функція такої *EPR*-пари (7.6) описує скорельований стан двох частинок із координатами  $x_1$  та  $x_2$ , відстань між якими дорівнює  $x_{12}^0$ , а повний імпульс становить  $p_{12}^0$ . Будемо називати ці частинки *EPR* “1–2”-парою. Вважатимемо, що хвильова функція  $\Psi = \Psi(x_3)$  третьої частинки з координатою  $x_3$  нормована на одиницю. Хвильова функція всієї системи трьох частинок дорівнює добуткові:

$$\Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2, x_3) = \Psi(x_3) \Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2). \quad (7.7)$$

Вона нормована як звичайно для неперервних значень квантових чисел  $x_{12}^0$  та  $p_{12}^0$  на дельта-функції.

***Поставимо перед собою завдання телепортувати стан  $\Psi$  з третьої частинки на першу.***

З цією метою проведемо в нашій системі дві операції вимірювання. Спочатку виміряємо й зафіксуємо відстань між другою та третьою частинками й позначимо її через  $x_{12}^0$ . У результаті цієї операції початковий стан нашої системи зміниться і її хвильова функція зредукується до  $\Psi'(x_1, x_2, x_3)$ . На другому етапі виміряємо повний імпульс  $p_{23}^0$  другої і

третьої частинок. Після цього стан системи трьох частинок буде описувати хвильова функція  $\Psi''(x_1, x_2, x_3)$ . Знайдемо тепер явний вигляд цієї функції.

Для того щоб провести перший вимір, тобто виміряти координати другої і третьої частинок, ми повинні, насамперед, хвильову функцію початкового стану розкласти в ряд (у нашому випадку інтеграл) за власними функціями відповідних операторів координат  $\hat{x}_2 = x_2$  та  $\hat{x}_3 = x_3$ . Оскільки ці оператори ми беремо у власному, тобто координатному, зображенні, то їхні власні функції є дельта-функціями і отже, маємо:

$$\Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2, x_3) = \int dx'_2 \int dx'_3 \delta(x'_2 - x_2) \delta(x'_3 - x_3) \Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x'_2, x'_3). \quad (7.8)$$

Вимірювання відстані між другою і третьою частинками означає, що в цьому розкладі ми повинні брати інтеграли за  $x'_2, x'_3$  при умові, що  $(x'_2 - x'_3) = x_{23}^0$ . У результаті початковий стан системи трьох частинок редукується (7.8) до:

$$\begin{aligned} \Psi'(x_1, x_2, x_3) = C' \int dx'_2 \int dx'_3 \delta(x'_2 - x'_3 - x_{23}^0) \delta(x'_2 - x_2) \delta(x'_3 - x_3) \times \\ \times \Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x'_2, x'_3), \end{aligned} \quad (7.9)$$

тут стала  $C'$  уведена для того, щоб забезпечити умову нормування зредукованої хвильової функції. Інтеграли, завдяки дельта-функціям, беруться тут елементарно, і ми знаходимо, що:

$$\Psi'(x_1, x_2, x_3) = C' \delta(x_2 - x_3 - x_{23}^0) \Psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2, x_3). \quad (7.10)$$

Використаймо явний вигляд хвильової функції початкового стану (7.6) і з (7.10) знайдемо, що:

$$\Psi'(x_1, x_2, x_3) = C' \Psi(x_3) \delta(x_2 - x_3 - x_{23}^0) \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0) \frac{e^{ip_{12}x_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

або, беручи до уваги властивості дельта-функції (7.7) та позначивши  $x_{13}^0 = x_{12}^0 + x_{23}^0$ , отримаємо:

$$\begin{aligned} \Psi'(x_1, x_2, x_3) = C' \delta(x_2 - x_3 - x_{23}^0) \delta(x_1 - x_3 - x_{13}^0) \times \\ \times \Psi(x_1 - x_{13}^0) \frac{e^{ip_{12}x_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Тепер перейдемо до вимірювання повного імпульсу другої та третьої частинок. Для цього знову спочатку розкладаємо  $\Psi'(x_1, x_2, x_3)$  в ряди

(насправді інтеграли) за власними функціями операторів імпульсів  $\hat{p}_2$  та  $\hat{p}_3$ , тобто за хвилями де Бройля:

$$\psi'(x_1, x_2, x_3) = \int dp_2 \int dp_3 \frac{e^{ip_2 x_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{ip_3 x_3/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} C(p_2, p_3), \quad (7.12)$$

$$\text{де } C(p_2, p_3) = \int dx'_2 \int dx'_3 \frac{e^{-ip_2 x'_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-ip_3 x'_3/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi'(x_1, x'_2, x'_3).$$

Тоді згідно з тим, що ми фіксуємо повний імпульс значенням  $p_{23}^0$ , то з цього розкладу залишаємо доданок, у якому  $p_2 + p_3 = p_{23}^0$ . Тобто стан  $\psi'(x_1, x_2, x_3)$  (7.12) редукується до:

$$\psi''(x_1, x_2, x_3) = C'' \int dp_2 \int dp_3 \delta(p_2 + p_3 - p_{23}^0) \frac{e^{ip_2 x_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{ip_3 x_3/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} C(p_2, p_3). \quad (7.13)$$

Стала  $C''$  вводиться у (7.13) з огляду на нормування хвильової функції.

Підставимо вираз (7.13) функцію  $C(p_2, p_3)$  (7.12) з урахуванням явного вигляду функції  $\psi'(x_1, x_2, x_3)$  (7.9):

$$\begin{aligned} \psi''(x_1, x_2, x_3) &= C'' \int dx'_2 \int dx'_3 \int dp_2 \delta(p_2 + p_3 - p_{23}^0) \times \\ &\quad \times \frac{e^{i(x_2 - x'_2)p_2/\hbar}}{2\pi\hbar} \frac{e^{i(x_3 - x'_3)p_3/\hbar}}{2\pi\hbar} \psi'(x_1, x'_2, x'_3) = \\ &= C'' C' \psi(x_1 - x_{13}^0) \int dx'_2 \int dx'_3 \int dp_2 \int dp_3 \delta(p_2 + p_3 - p_{23}^0) \times \\ &\quad \times \frac{e^{i(x_2 - x'_2)p_2/\hbar}}{2\pi\hbar} \frac{e^{i(x_3 - x'_3)p_3/\hbar}}{2\pi\hbar} \times \\ &\quad \times \delta(x'_2 - x'_3 - x_{23}^0) \delta(x_1 - x'_3 - x_{13}^0) \frac{e^{ip_{12}^0 x'_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Інтегрування (7.14) досить не складне, оскільки три  $\delta$ -функції знімають інтегрування за  $x'_2, x'_3$  і, наприклад, за  $p_3$ , тоді залишається інтеграл за  $p_2$ , який дає  $\delta$ -функцію від просторових координат:

$$\begin{aligned}
\Psi''(x_1, x_2, x_3) &= C''C'\Psi(x_1 - x_{13}^0) \int dx'_2 \int dp_2 \int dp_3 \times \\
&\times \delta(p_2 + p_3 - p_{23}^0) \frac{e^{i(x_2 - x'_2)p_2/\hbar}}{2\pi\hbar} \frac{e^{i(x_3 - x_1 + x_{13}^0)p_3/\hbar}}{2\pi\hbar} \times \\
&\times \delta(x'_2 - x_1 + x_{13}^0 - x_{23}^0) \frac{e^{ip_{12}^0 x'_2/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \\
&= C''C'\Psi(x_1 - x_{13}^0) \frac{e^{ip_{12}^0(x_1 - x_{13}^0 + x_{23}^0)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \times \\
&\times \int dp_2 \int dp_3 \delta(p_2 + p_3 - p_{23}^0) \frac{e^{i(x_2 - x_1 + x_{13}^0 - x_{23}^0)p_2/\hbar}}{2\pi\hbar} \times \\
&\times \frac{e^{i(x_3 - x_1 + x_{13}^0)p_3/\hbar}}{2\pi\hbar} = \\
&= C''C'\Psi(x_1 - x_{13}^0) \frac{e^{ip_{12}^0(x_1 - x_{13}^0 + x_{23}^0)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \times \\
&\times \frac{e^{i(x_3 - x_1 + x_{13}^0)p_{23}^0/\hbar}}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_2 e^{i(x_2 - x_3 - x_{23}^0)p_2/\hbar} = \\
&= \frac{C''C'}{2\pi\hbar} \Psi(x_1 - x_{13}^0) e^{ip_{12}^0(x_1 - x_{13}^0 + x_{23}^0)/\hbar} \frac{e^{i(x_3 - x_1 + x_{13}^0)p_{23}^0/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \times \\
&\times \delta(x_2 - x_3 - x_{23}^0).
\end{aligned} \tag{7.15}$$

Остаточно (7.15) запишемо таким чином:

$$\Psi''(x_1, x_2, x_3) = e^{i\alpha(x_1)} \Psi(x_1 - x_{13}^0) \delta(x_2 - x_3 - x_{23}^0) \frac{e^{ip_{23}^0 x_3/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \tag{7.16}$$

де

$$\alpha(x_1) = p_{23}^0(x_{12}^0 + x_{23}^0)/\hbar - p_{12}^0 x_{12}^0/\hbar + x_1(p_{12}^0 - p_{23}^0)/\hbar, \tag{7.17}$$

причому для забезпечення нормування ми поклали:  $C''C' = 2\pi\hbar$ .

*В результаті маємо вирішення поставленої задачі.* Справді, хвильова функція  $\psi$  описує систему трьох частинок, із яких друга і третя є сплутаною *EPR* “2-3”-парою, а стан першої частинки описується хвильовою функцією  $\Psi$ .

Отже, в результаті проведення операції, що складається з двох вимірювань, стан  $\Psi$ , з точністю до фазового множника (7.17), ми “перекинули”, тобто телепортувати, з третьої частинки на першу. Причому, що важливо, ми “не торкались” першої частинки: виміри виконували над другою і третьою частинками.

*Важливо також, що відстань до першої частинки від двох інших може бути будь-якою за величиною.* Наприклад, перша частинка може бути в околиці будь-якого сузір’я, а дві решти – в лабораторії на Землі.

Ми ж “не торкались” першої частинки, але вона була в *EPR* “1-2”-парі, і зрозуміло, що завдяки саме цьому і стало можливим телепортування. Тобто перекидання стану  $\Psi$  відбулось якраз цим квантовим каналом!

Оскільки стан  $\Psi$  під час телепортування дещо спотворюється набіганням фазового множника зі змінною фазою  $\alpha(x_1)$  (7.17), то для точного відтворення хвильової функції  $\Psi$  нам потрібно значення величин  $p_{12}^0, p_{23}^0$  передати звичайним класичним каналом (навіть будь-якими засобами, наприклад, звичайною поштою) на першу частинку. Можна, звісно, під час другого виміру підібрати  $p_{23}^0 = p_{12}^0$ , і ця проблема зникає (однак про це також потрібно повідомити).

Що стосується сталої складової фази  $\alpha(x_1)$ , то з нею, зрозуміло, ніяких проблем немає. Підкреслимо, що класичний канал передачі інформації завжди потрібний, бодай для того, щоб повідомити, що телепортація відбулась.

Отже, для експериментального спостереження явища квантової телепортації потрібно спочатку мати в своєму розпорядженні *EPR* “1-2”-пару, а пізніше всю винахідливість спрямувати на реалізацію двох указаних вище вимірювань.

На завершення декілька слів про фізичну *неможливість реалізації класичної телепортації*, тобто неможливість “перекидання” точних значень динамічних змінних, які забезпечують класичний опис системи. Такими змінними є, наприклад, узагальнені координати та канонічно

спряжені до них імпульси. Отже, не торкаючись питання самого механізму класичного телепортування, важливо те, що принцип невизначеностей Гайзенберга не дозволяє одночасно знати точні значення координат та імпульсів. У результаті класичне телепортування дасть таке спотворення об'єкта, що годі й говорити, власне, про його телепортацію.

### 7.2.3. Спінові стани системи частинок.

За інформацією, про яку ми дізнались з попередніх пунктів можна зробити висновок, що спінові стани відіграють винятково важливу роль у фізичних та хімічних властивостях атомів та молекул. Тепер більш докладно проаналізуємо ці стани для систем частинок, що мають спін  $\hbar/2$ , у зв'язку з так званою квантовою телепортацією.

**Розглянемо систему двох частинок.** Якщо в системі немає спінових взаємодій, то спінова хвильова функція системи двох частинок дорівнює добуткові спінових функцій окремих частинок. Можливими є чотири різні стани з проекціями повного спіну, рівними  $\hbar, -\hbar, 0, 0$ . Ці стани такі (індекси біля стрілок указують номери частинок):

$$|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle, |\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle, |\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle, |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle.$$

Із цих станів можна утворити чотири суперпозиційні стани, або так звані сплутані стани Белла:

$$\begin{aligned} |\Psi_{12}^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle \pm |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle), \\ |\Phi_{12}^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle \pm |\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Вони є ортонормованими, в цьому легко пересвідчитись, беручи до уваги умови ортонормованості вихідних станів:

$$\begin{aligned} \langle\uparrow_1|\uparrow_1\rangle &= 1, & \langle\uparrow_1|\downarrow_1\rangle &= 0, & \langle\uparrow_2|\uparrow_2\rangle &= 1, & \langle\uparrow_2|\downarrow_2\rangle &= 0, \\ \langle\downarrow_1|\uparrow_1\rangle &= 0, & \langle\downarrow_1|\downarrow_1\rangle &= 1, & \langle\downarrow_2|\uparrow_2\rangle &= 0, & \langle\downarrow_2|\downarrow_2\rangle &= 1. \end{aligned} \quad (7.19)$$

У цих сплутаних станах напрямок спіну кожної з частинок є невизначеним. Однак між напрямками спінів обох частинок існує квантова кореляція, яка не залежить від відстані між ними. Якщо, наприклад у стані  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$  (7.18), вимірювання проекції спіну першої частинки дає напрямок “спін уверх”, то вимірювання проекції спіну другої (яка може перебувати як

завгодно далеко від першої) доконечно дасть результат “спін униз”.

Мірою сплутаності є “відстань” суперпозиційного стану двох частинок:

$$\begin{aligned}\Psi_s &= a|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle + b|\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle + c|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle + d|\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle, \\ |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 &= 1\end{aligned}\tag{7.20}$$

від факторизованого стану

$$\begin{aligned}\Psi_f &= (\alpha|\uparrow_1\rangle + \beta|\downarrow_1\rangle)(\gamma|\uparrow_2\rangle + \delta|\downarrow_2\rangle), \\ |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad |\gamma|^2 + |\delta|^2 &= 1,\end{aligned}\tag{7.21}$$

коли вони є незалежними.

Легко перевірити, що стани  $\Psi_s$  та  $\Psi_f$  збігаються за умови:

$$\alpha\gamma = c, \quad \alpha\delta = a, \quad \beta\gamma = b, \quad \beta\delta = d,\tag{7.22}$$

тобто коли  $(ab - cd) = 0$ .

З перших двох рівнянь (7.22) маємо  $\gamma/\delta = c/a$ , з решти двох (7.22) –  $\gamma/\delta = b/d$ . Отже, мірою сплутаності станів, тобто “відстанню” між ними, може слугувати величина  $|ab - cd|$ . Для розглянутих станів  $|\Psi_{12}^\pm\rangle$ ,  $|\Phi_{12}^\pm\rangle$  ця величина досягає максимального значення, рівного 1/2.

Вихідні стани (7.18) неважко переписати як суперпозицію станів  $|\Psi_{12}^\pm\rangle$  та  $|\Phi_{12}^\pm\rangle$ :

$$\begin{aligned}|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi_{12}^+\rangle + |\Phi_{12}^-\rangle), \\ |\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi_{12}^+\rangle - |\Phi_{12}^-\rangle), \\ |\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{12}^+\rangle + |\Psi_{12}^-\rangle), \\ |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{12}^+\rangle - |\Psi_{12}^-\rangle).\end{aligned}\tag{7.23}$$

Важливо також зауважити, що стани  $|\Psi_{12}^+\rangle$ ,  $|\Phi_{12}^+\rangle$ ,  $|\Phi_{12}^-\rangle$  є симетричними щодо перестановок номерів частинок, а стан  $|\Psi_{12}^-\rangle$  антисиметричний.

Розгляньмо тепер систему трьох частинок, одна з яких, наприклад перша, перебуває в стані:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_1 &= a|\uparrow_1\rangle + b|\downarrow_1\rangle, \\ a &= \langle\uparrow_1|\psi\rangle_1, \quad b = \langle\downarrow_1|\psi\rangle_1, \\ |a|^2 + |b|^2 &= 1, \end{aligned} \quad (7.24)$$

Тоді як стан другої та третьої частинки описує хвильова функція (7.18):

$$|\Psi_{23}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_2\rangle|\downarrow_3\rangle - |\downarrow_2\rangle|\uparrow_3\rangle). \quad (7.25)$$

Повна хвильова функція дорівнює добутку:

$$|\Psi_{123}\rangle = |\Psi_{23}^-\rangle|\psi\rangle_1. \quad (7.26)$$

*Поставимо тепер таке питання:* якщо ми переведемо першу й другу частинки в суперпозиційний сплутаний стан  $|\Psi_{12}^-\rangle$ , то у якому стані перебуватиме третя частинка? Відповідь на це ми знайдемо, якщо стан  $|\Psi_{123}\rangle$  розкладемо за базисом  $|\Psi_{12}^\pm\rangle$ ,  $|\Phi_{12}^\pm\rangle$ , що утворює повний набір. Отже, маємо:

$$\begin{aligned} \langle\Psi_{12}^+|\Psi_{123}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\uparrow_1|\psi\rangle_1\langle\downarrow_2|\Psi_{23}^-\rangle + \langle\downarrow_1|\psi\rangle_1\langle\uparrow_2|\Psi_{23}^-\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a\langle\downarrow_2|\Psi_{23}^-\rangle + b\langle\uparrow_2|\Psi_{23}^-\rangle), \end{aligned} \quad (7.27)$$

де, згідно з означеннями (7.18):

$$\begin{aligned} \langle\downarrow_2|\Psi_{23}^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\downarrow_2|\uparrow_2\rangle\langle\downarrow_3\rangle - \langle\downarrow_2|\downarrow_2\rangle\langle\uparrow_3\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\uparrow_3\rangle, \\ \langle\uparrow_2|\Psi_{23}^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\uparrow_2|\uparrow_2\rangle\langle\downarrow_3\rangle - \langle\uparrow_2|\downarrow_2\rangle\langle\uparrow_3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\downarrow_3\rangle, \end{aligned}$$

і отже:

$$\langle \Psi_{12}^+ | \Psi_{123} \rangle = \frac{1}{2} (-a | \uparrow_3 \rangle + b | \downarrow_3 \rangle). \quad (7.28)$$

Аналогічно знаходимо решту проекцій:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{12}^- | \Psi_{123} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \downarrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle + \langle \downarrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \uparrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-a | \uparrow_3 \rangle - b | \downarrow_3 \rangle) = -\frac{1}{2} | \Psi \rangle_3, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{12}^+ | \Psi_{123} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \downarrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle + \langle \downarrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \uparrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a | \downarrow_3 \rangle - b | \uparrow_3 \rangle), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{12}^- | \Psi_{123} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \uparrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle + \langle \downarrow_1 | \Psi \rangle_1 \langle \downarrow_2 | \Psi_{23}^- \rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a | \downarrow_3 \rangle + b | \uparrow_3 \rangle). \end{aligned}$$

Отже, ми отримуємо такий розклад:

$$\begin{aligned} | \Psi_{123} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ (-a | \uparrow_3 \rangle - b | \downarrow_3 \rangle) | \Psi_{12}^+ \rangle + (-a | \uparrow_3 \rangle - b | \downarrow_3 \rangle) | \Psi_{12}^- \rangle + \\ &+ (a | \downarrow_3 \rangle - b | \uparrow_3 \rangle) | \Phi_{12}^+ \rangle + (a | \downarrow_3 \rangle + b | \uparrow_3 \rangle) | \Phi_{12}^- \rangle ]. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Розклад (7.29) можна знайти зовсім просто:

$$\begin{aligned} | \Psi_{123} \rangle &= | \Psi_{23}^- \rangle | \Psi \rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow_2 \rangle | \downarrow_3 \rangle - | \downarrow_2 \rangle | \uparrow_3 \rangle) (a | \uparrow_1 \rangle + b | \downarrow_1 \rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ a | \uparrow_1 \rangle | \uparrow_2 \rangle | \downarrow_3 \rangle - a | \uparrow_1 \rangle | \downarrow_2 \rangle | \uparrow_3 \rangle + b | \downarrow_1 \rangle | \uparrow_2 \rangle | \downarrow_3 \rangle - b | \downarrow_1 \rangle | \downarrow_2 \rangle | \uparrow_3 \rangle ], \end{aligned}$$

і якщо, замість вихідних станів першої і другої частинки, підставити сюди їхні вирази через  $| \Psi_{12}^\pm \rangle$ ,  $| \Phi_{12}^\pm \rangle$  (7.18), то зразу отримаємо попередню формулу.

*Тепер ми маємо відповідь на наше запитання.* А саме, згідно з принципом суперпозиції, множник біля  $| \Psi_{12}^- \rangle$  і визначає стан, у якому

перебуває третя частинка, якщо перші дві перебувають у сплутаному стані  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$ . Як бачимо, цей множник дорівнює:

$$-a|\uparrow_3\rangle - b|\downarrow_3\rangle = -|\psi\rangle_3 = e^{i\pi}|\psi\rangle_3, \quad (7.30)$$

і, таким чином, третя частинка є у стані  $|\psi\rangle$ ; ми не беремо до уваги фазового множника  $(-)=e^{i\pi}$ .

Отже, маємо справу з квантовою телепортацією, яку ми описали в попередньому параграфі для хвильових функцій з неперервними індексами станів. Справді, якщо початковий спіновий стан системи трьох частинок був приготовлений так, що друга і третя частинки перебували в сплутаному стані  $|\Psi_{23}^{-}\rangle$ , а перша у стані  $|\psi\rangle$ , то в результаті деякої спеціальної операції (або спеціального вимірювання), проведеної над першою і другою частинками, що переводить їх у стан  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$ , третя частинка опиниться у стані  $|\psi\rangle$ . Тобто ми телепортувати стан  $|\psi\rangle$  з першої частинки на третю.

**Як приклад обговоримо можливу телепортацію електрона.** При розщепленні парапозитронію (зв'язаного стану електрона і позитрона з сумарним спіном, рівним нулеві), наприклад під дією пари фотонів, виникає сплутана *EPR* “1–2”-пара “електрон плюс позитрон”.

Якщо до цієї пари долучити ще один електрон (нехай це частинка під номером три), який рухатиметься у стані “спін вгору” (або “спін униз”) назустріч позитронові, і якщо вони утворять парапозитроній, то це означитиме, що позитрон захоплено у зв'язаний стан зі спіном униз (або вгору), а також що перший електрон раптом опинився також у стані “спін вгору” (або “спін униз”), хоча доти він не мав певного спінового стану.

Справді, ми маємо відомості лише щодо повного, рівного нулеві, спіну початкового парапозитронію, а не окремо про кожну з частинок із цієї сплутаної пари.

Отже, спіновий стан електрона, що числиться в нас частинкою номер три, телепортується до першого, який утворився після розпаду початкового парапозитронію, і хтозна, на якій великій відстані він перебуває від точки, де утворився новий парапозитроній.

Якщо мова йде про експериментальне підтвердження явища квантової телепортації, то принциповими моментами є приготування сплутаного

стану  $|\Psi_{23}^{-}\rangle$  та мистецтво експериментатора “витягування” зі стану  $|\Psi_{123}\rangle$  сплутаної складової  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$ . Як ми вже зазначали, це вдалось зробити 1997 року на фотонах, частинках, які також мають два можливі стани поляризації.

#### 7.2.4. Телепортація фотонів

Обговоримо Інсбрукський експеримент 1997 року з телепортації фотонів, про який йшлося в попередніх двох параграфах.

Оскільки фотон має дві можливі поляризації, то одиничний вектор поляризації  $\vec{e}_{k,\alpha}$  [Вак§59], відіграє роль спінової складової хвильової функції фотона. Отже, ми знову маємо квантово-механічний об’єкт із двома станами, тому всі результати і висновки для частинок зі спіном  $\hbar/2$  формально переносимо на фотони щодо їх поляризаційних станів. Зокрема зі станом “спін униз” зіставляємо стан фотона з вертикальною поляризацією, позначмо його як  $|\downarrow\rangle$ ; стан із горизонтальною поляризацією фотона  $|\leftrightarrow\rangle$  відповідатиме станові “спін угору”:

$$|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

Тепер пригадаймо ситуацію з телепортацією спінового стану з п.7.2.3 (7.24) і переформулюймо її висновки на теперішній випадок. Отже, здамо стан трьох фотонів так, що один із них, наприклад, перший, перебуває у спеціально підготованому стані:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_1 &= a|\leftrightarrow\rangle + b|\downarrow\rangle, \\ |a|^2 + |b|^2 &= 1, \end{aligned} \quad (7.32)$$

а два інші у сплутаному суперпозиційному стані (7.25):

$$|\Psi_{23}^{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle_2|\downarrow\rangle_3 - |\leftrightarrow\rangle_3|\downarrow\rangle_2). \quad (7.33)$$

позаяк хвильова функція, що описує систему трьох фотонів у початковому стані, дорівнює (7.26).

Спроекуємо  $|\Psi_{123}\rangle$  на сплутаний стан  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$  першого і другого фотонів. Як показано в п.7.2.3, ця проекція дорівнює  $-1/2|\Psi\rangle_3$ . Тобто стан

$|\psi\rangle$  в результаті такого проектування “перекидається” зі знаком мінус із першого фотона на третій. Кінцева хвильова функція трьох фотонів:

$$|\psi'_{123}\rangle = -|\Psi_{12}^-\rangle|\psi\rangle_3, \quad (7.34)$$

а ймовірність реалізації такої події дорівнює  $(-1/2)^2 = 1/4$ .

Саме цю телепортацію і виявили в інституті експериментальної фізики Інсбрукського університету. Розгляньмо схему цього унікального експерименту (рис. 1.32).

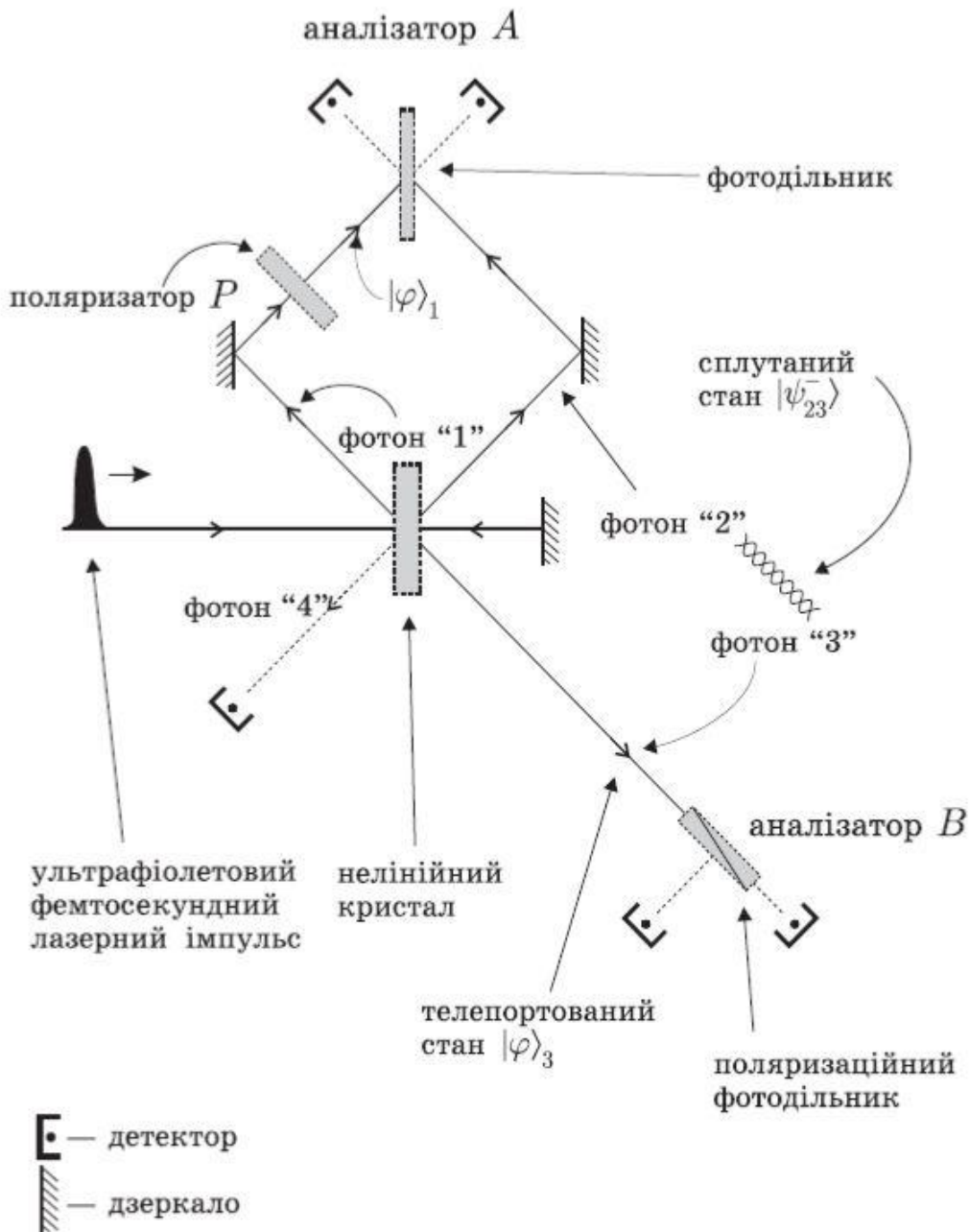


Рис. 1.32

Короткий фемтосекундний імпульс ультрафіолетового лазерного променя поширюється зліва направо крізь нелінійний кристал. Кристал час від часу перетворює поодинокі ультрафіолетові фотони у два червоні фотони (“2” та “3”) з нижчою енергією, тобто відбувається процес двофотонного випромінювання. Один з фотонів поляризований вертикально, а інший – горизонтально.

Народжені фотони поширюються в межах поверхонь двох конусів випромінювання, у кожному з яких вони мають певну поляризацію завдяки явищу подвійного променезаломлення (в оптично одновісних кристалах так звана звичайна хвиля поляризована перпендикулярно до площини головного перерізу, тобто площини, яка проходить через лінію напрямку променя і оптичну вісь кристала, а інша незвичайна хвиля поляризована паралельно до головного перерізу, тобто в достатньо товстих кристалах звичайна й незвичайна хвилі є просторово розділеними).

На двох лініях перетину цих конусів фотони не матимуть визначеної поляризації: вони перебуватимуть у суперпозиційному стані. Причому, наприклад, звичайними поворотами кристала можна приготувати антисиметричну суперпозицію їхніх поляризаційних станів. Позначимо ці фотони номерами “2” та “3”. Отже, ми маємо сплутаний стан  $|\Psi_{23}^-\rangle$ , тобто приготували EPR “2–3”-пару фотонів.

Фотон “2” після відбивання від дзеркала рухається до аналізатора А. Відбита від дзеркала частина первинного імпульсу знову проходить крізь кристал і породжує два інші фотони – “1” та “4”. Поляризатор  $P$  приготує стан  $|\psi\rangle$  для фотона “1”. Детектор фіксує фотон “4” і цим підтверджує, що фотон “1” був відісланий також до аналізатора А.

Отже, у деякий момент часу приготовлено початковий стан  $|\Psi_{123}\rangle$  системи з трьох частинок, а саме: з фотона “1” у стані  $|\psi\rangle$ , який направлено до аналізатора А, фотона “2” з EPR “2–3”-пари, що рухається також до А, і “3”-го фотона з цієї пари на шляху до аналізатора В.

Переходимо нарешті до аналізу результатів вимірювання над фотонами “1” та “2”. В аналізаторі А, який складається з напіввідбиваючого дзеркала, відбувається розщеплення променів: кожен окремий фотон має “п’ятдесят на п’ятдесят” шансів пройти крізь дзеркало або відбитися. Отже, кожен із фотонів перебуває в суперпозиційному стані.

Якщо два ідентичні фотони “вдаряють” у той самий час об дзеркало кожен зі свого боку, то відбита частина променя й та, що пройшла, інтерферують і фотони тим самим утрачають свою індивідуальність. Повна хвильова функція фотонів як бозе-частинок дорівнює добутковій просторової частини на “спінову”, тобто поляризаційну, і повинна бути симетричною щодо їх перестановок.

Два фотони залишають дзеркало в одному напрямку (одному пучку), якщо їх просторова хвильова функція є симетричною, тобто вони обидва потрапляють в один із детекторів. Щоб потрапити в різні детектори, вони повинні описуватись антисиметричною частиною просторової хвильової функції.

Справді, фотони потрапляють одночасно в різні детектори, якщо вони обидва або проходять крізь напівпрозоре дзеркало, або обидва відбиваються. А підрахунок ймовірності такої події, згідно з принципами квантової механіки, робимо так: беремо суму просторових амплітуд цих двох альтернативних подій і підносимо її модуль до квадрата. Нагадаємо, що при відбиванні амплітуда електромагнітної хвилі набирає додаткової фази стосовно амплітуди хвилі, яка пройшла крізь дзеркало. Іншими словами, у просторової частини хвильової функції фотона при цьому набігає деяка фаза (при проходженні частинки крізь потенціальний бар'єр (яким тут для фотона є напівпрозоре дзеркало), хвиля, що пройшла крізь бар'єр, набуває стосовно відбитої хвилі додаткової фази  $(\pi/2 - ka)^2$ ,  $k = 2\pi/\lambda$  – хвильовий вектор частинки,  $\lambda$  – довжина хвилі. Наприклад, для тонкого бар'єра,  $a \rightarrow 0$ , ця додаткова фаза дорівнює  $\pi/2$ , а якщо ширину бар'єра вибрати рівною  $3/4$  довжини хвилі,  $a = 3\lambda/4$ , то додаткова фаза має дорівнювати  $(-\pi)$  [1, §25]).

Отже, при утворенні сплутаного стану двох фотонів, коли їх реєструють одночасно в різних детекторах, просторову частину хвильової функції можна зробити антисиметричною підбором цієї фази. Тобто амплітуда другої події (мова йде про відбивання фотонів) додається зі знаком мінус, якщо фазу підібрати рівною  $\pi$ . Коли просторова частина хвильової функції є антисиметричною, то зрозуміло, що фотони не можуть бути в одному пучку, оскільки така хвильова функція просто буде рівна нулеві, і тому вони потрапляють в різні детектори. У цьому випадку для

збереження симетричності повної хвильової функції її поляризаційна частина мусить бути також антисиметричною, тобто дорівнювати  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$ .

Тому, якщо два детектори спрацьовують одночасно (схема увімкнута на збіжність), то ми знаємо, що фотони “1” та “2” перебувають у сплутаному антисиметричному стані  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$ . А це, своєю чергу, говорить про те, що частинка “3” перебуває у стані  $(-)|\psi\rangle_3$ . Тобто, як тільки два детектори в аналізаторі *A* спрацювали одночасно, можна звідси передавати класичним каналом інформацію до точки *B* про те, що в аналізаторі *B* повинен виявитись стан  $(-)|\psi\rangle$ . Тим самим, стан  $|\psi\rangle$  телепортовано з частинки “1” на частинку “3”.

Нехай для визначеності фотон “1” приготовано поляризатором *P* у стані з  $45^\circ$ -ною поляризацією (див. вак. §95), тобто його початкова хвильова функція:

$$|\psi\rangle = |\nearrow\rangle, \rightarrow \rightarrow \rightarrow |\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle). \quad (7.35)$$

Для аналізу поляризаційного стану фотона “3” використовувалось поляризаційне дзеркало з двома детекторами. Один із них налаштований на  $45^\circ$ -стан, тобто на виявлення стану  $|\psi\rangle$ , а інший – на перпендикулярний до нього  $(-45^\circ)$ -стан. Якщо спрацювали одночасно два детектори – в аналізаторі *A* і  $45^\circ$ -детектор в аналізаторі *B*, то можна говорити про телепортацію за умови, що  $(-45^\circ)$ -детектор “промовчав”.

Справді, при телепортації ймовірність одночасного спрацьовування двох детекторів в аналізаторі *A* дорівнює  $1/4$ , оскільки при цьому реалізується стан  $|\Psi_{12}^{-}\rangle$  – один із чотирьох базисних станів Белла ( $\Psi_{12}^{-}, \Psi_{12}^{+}, \Phi_{12}^{-}, \Phi_{12}^{+}$ ). Ймовірність спрацювання в цей момент  $45^\circ$ -детектора в аналізаторі *B* дорівнює одиниці, і отже, повна ймовірність того, що ці три детектори “заговорять” одночасно, дорівнює  $1/4$ . При цьому важливо, що при телепортації  $(-45^\circ)$ -детектор у *B* не спрацьовує.

Припустимо, що фотони “1” та “2” “вдарять” у дзеркало аналізатора *A* неодноразово, тобто вони не інтерферують. Це легко зробити, затримавши фотон “1” на його шляху до *A*, наприклад, зміною положення дзеркала, що

відбиває первісний фемтосекундний імпульс. Тепер імовірність одночасного спрацювання обох детекторів в  $A$  дорівнює двом шансам із чотирьох: обидва фотони або відбиваються від дзеркала, або обидва пройшли крізь нього. Тоді як ймовірність спрацювання кожного з детекторів у  $B$  дорівнює  $1/2$ . Так що ймовірність одночасного спрацювання трьох детекторів (двох в  $A$  і одного в  $B$ ) дорівнює  $2/4 \times 1/2 = 1/4$ . Тобто маємо ту саму ймовірність, що і при телепортації, однак тепер спрацює і  $(-45^\circ)$ -детектор в аналізаторі  $B$ . Отже, якщо підрахувати кількість спрацювань  $(-45^\circ)$ -детектора залежно від часу затримки фотона "1", то в мінімумі цієї залежності (який теоретично дорівнює нулеві) матимемо телепортацію стану  $|\psi\rangle$  з точки  $A$  в точку  $B$ .

## Контрольні запитання до лекції 7

1. У чому суть парадоксу з котом Шрьодінгера? Як він ілюструє проблему квантового вимірювання?
2. Які основні ідеї прихованих параметрів у теорії де Бройля – Бома?
3. Чому парадокс де Бройля – Бома суперечить традиційній інтерпретації квантової механіки?
4. Яке фізичне значення парадоксу Айнштейна – Подольського – Розена (EPR-парадоксу)?
5. Як квантова механіка вирішує проблему далекодійності у парадоксі EPR?
6. Що таке сплутані EPR-стани, і як вони пов'язані з принципом локальності?
7. Яким чином квантова телепортація передає стан частинки без передачі самої частинки?
8. Як квантова механіка описує спінові стани системи частинок?
9. Які експериментальні підтвердження існування квантової телепортації?
10. Чому телепортація фотонів є важливою для квантових комунікацій?

# ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВИХ КОМП'ЮТЕРІВ

## Лекція 8

### Квантовий комп'ютер. Квантова криптографія. Квантове обладнання. Призначення та проблеми квантових комп'ютерів

#### 8.1. Основні принципи роботи квантових комп'ютерів

*Квантові комп'ютери працюють на основі принципів квантової механіки та математики.* Як нині відомо, ці основи відрізняються від законів класичної механіки та виявляють порівняно з класичними обчислювальними машинами принципові переваги завдяки використанню суттєво квантових ефектів

Розглянемо основні принципи, на яких базується робота квантових комп'ютерів:

##### 1. Кубіти:

Неподільна одиниця класичної інформації, що набуває два значення – 0 і 1, має назву “біт”. Квантові системи з двома станами називають квантовими бітами (qubits), скорочено – кубітами або квабітами, базисом яких є:

$$|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8.1)$$

$$|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тобто кубіт – це нормовані на одиницю вектори двовимірного гільбертового простору [вак§14]. Він може зображати числа 0 і 1. Кубітом може слугувати будь-яка квантова система, яка має два стани (або й більше).

Прямий добуток двох кубітів дає:

$$\begin{aligned}
 |00\rangle = |0\rangle|0\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |01\rangle = |0\rangle|1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |10\rangle = |1\rangle|0\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |11\rangle = |1\rangle|1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{8.2}$$

Тобто базис у 4-вимірному гільбертовому просторі, який може зображати числа від 0 до 3.

Прямий добуток  $N$  кубітів очевидно утворює базис, вектор  $x$  у якому дозволяє зображати всі цілі числа від 0 до  $2N - 1$  ( $N$ -кубітовий регістр):

$$\begin{aligned}
 |x\rangle &= |x_{N-1}x_{N-2}\dots x_2x_1x_0\rangle, \\
 x_j &= (0,1), \quad j = 0, \dots, N-1.
 \end{aligned}
 \tag{8.3}$$

Це надає квантовим комп'ютерам значно більшу обчислювальну потужність для певних задач.

2. **Суперпозиція:**

Суперпозиція дозволяє кубіту бути одночасно в обох станах (0 і 1). Це дає змогу квантовому комп'ютеру виконувати багато обчислень паралельно.

3. **Заплутаність:**

Квантові частинки можуть бути заплутані, тобто стан однієї частинки буде безпосередньо пов'язаний зі станом іншої, незалежно від відстані між ними. Це дозволяє квантовим комп'ютерам виконувати складні обчислення набагато швидше, ніж класичні комп'ютери.

4. **Інтерференція:**

Квантові стани можуть інтерферувати один з одним. Квантові комп'ютери використовують інтерференцію для контролю й маніпулювання ймовірностями результатів квантових обчислень. Квантові алгоритми використовують інтерференцію для підсилення ймовірностей правильних відповідей і зменшення ймовірностей неправильних

## 5. Квантові гейти:

Як і класичні комп'ютери використовують логічні вентиля (AND, OR, NOT) для виконання операцій над бітами, квантові комп'ютери використовують квантові гейти для маніпуляції кубітами. Квантові гейти дозволяють змінювати стан кубітів за допомогою операцій, що відповідають принципам квантової механіки.

### 8.1.1. Оператори та однокубітовий комп'ютер

Розглянемо оператори – *квантові логічні елементи, що змінюють стани окремого кубіта і з яких складається машина під назвою квантовий комп'ютер*. Перетворення Адамара задаємо унітарним оператором [Вакарчук, §13]:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

Дію оператора (8.4) на вектор стану знаходимо:

$$\begin{aligned} \hat{H}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \\ \hat{H}|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (8.5)$$

Таким чином, цей оператор (8.4), (8.5) створює *суперпозиційні стани*:

$$\hat{H}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-)^x |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i\pi x} |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{y=0,1} e^{i\pi xy} |y\rangle. \quad (8.6)$$

Дія прямого добутку  $N$  операторів Адамара (8.4)  $\hat{H}_N$  на стан  $|x\rangle$  квантового регістра, що складається з  $N$  двостанових підсистем  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} \hat{H}_N |x\rangle &= \frac{1}{2^{N/2}} \sum_y e^{i\pi xy} |y\rangle, \\ xy &= \sum_{j=0}^{N-1} x_j y_j, \\ y_j &= (0,1), \end{aligned} \quad (8.7)$$

та 
$$\sum_y \equiv \sum_{y_0=0,1} \dots \sum_{y_{N-1}=0,1} . \quad (8.8)$$

Отже, дія оператора Адамара  $\hat{H}_N$  на стан  $|x\rangle$  переводить його в стан, що є суперпозицією  $2^N$  станів, і кожен з яких визначає натуральне число з області від 0 до  $2^N - 1$  (8.7).

Це найголовніша перевага квантового комп'ютера над класичним, адже в *класичному комп'ютері кожен його стан задає лише одне число, а у квантовому – його стан задає  $2^N$  чисел.*

Наприклад, якщо кубіти це атоми, то спеціально підібрані лазерні імпульси діють на їхні електронні стани і початкова суперпозиція  $2^N$  чисел еволюціонує до іншої суперпозиції так, що змінюється кожне вхідне число. Це означає, що квантовий комп'ютер за один крок проводить одну операцію над  $2^N$  різними вхідними числами паралельно, і в результаті на виході маємо суперпозицію  $2^N$  нових чисел. Класичний комп'ютер такі обчислення мусить проводити за  $2^N$  кроків або за один крок, але на  $2^N$  паралельно працюючих комп'ютерах.

Отже, квантовий комп'ютер дає великий виграш як часу обчислень, так об'єму пам'яті. *Ця властивість квантового комп'ютера має назву квантовий паралелізм*, і саме вона визначає його так звану надфективність.

Введемо ще один унітарний оператор, який називається оператором зміни фази:

$$\hat{\Phi}(\psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\psi} \end{pmatrix}. \quad (8.9)$$

Очевидно:

$$\hat{\Phi}(\psi|x\rangle) = e^{i\psi x} |x\rangle, \quad x = (0,1). \quad (8.10)$$

Виявляється, що цих двох операторів (8.9) та (8.10) достатньо для того, щоб сконструювати довільний унітарний квантовий оператор, тобто квантовий логічний елемент, що діє на один кубіт.

Наведемо зараз простий однокубітовий квантовий пристрій – так званий інтерферометр Маха – Цандера (рис. 1.33), де 1,4 – дільники частинок у відношенні 50/50; 2,3 – дзеркала;  $D_0, D_1$  – детектори частинок.

Нехай ми маємо напівпрозорий бар'єр для частинок, це може бути тонке напівпосріблене дзеркало 1, на яке падає фотон (рис. 1.33).

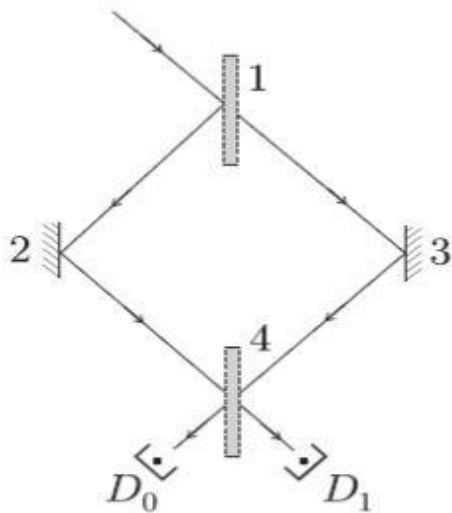


Рис. 1.33

Відбиваючись від двох звичайних плоских дзеркал 2 та 3, пучки розщепленого вихідного пучка знову сходяться на напівпосрібленому дзеркалі 4. Обчислимо ймовірності потрапляння частинки в детектори  $D_0$  та  $D_1$ . Амплітуда потрапляння частинки в детектор  $D_0$  правим шляхом дорівнює:

$$\frac{e^{i\pi/2}}{\sqrt{2}} \times \frac{e^{i\pi/2}}{\sqrt{2}} = \frac{e^{i\pi/2}}{2}, \quad (8.11)$$

оскільки частинка двічі проходить крізь бар'єр, щоразу уполовинюючи ймовірність, і двічі набуває фазу  $\pi/2$  (див. п.7.2.4).

Амплітуда потрапляння частинки в цей детектор лівим шляхом, коли вона лише відбивається від дзеркал, дорівнює  $1/\sqrt{2} \times 1/\sqrt{2} = 1/2$ . Повна амплітуда потрапляння в  $D_0$ , згідно з принципом суперпозиції, дорівнює сумі амплітуд правим та лівим шляхами:

$$A_0 = \frac{e^{i\pi}}{2} + \frac{1}{2} = 0, \quad (8.12)$$

і, отже, частинка ніколи не потрапить у детектор  $D_0$ .

Аналогічно обчислюємо й амплітуду потрапляння частинки в детектор  $D_1$ .

Першим правим шляхом амплітуда буде  $e^{i\pi/2}/\sqrt{2} \times 1/\sqrt{2} = e^{i\pi/2}/2$ , лівим шляхом маємо амплітуду, рівну  $1/\sqrt{2} \times e^{i\pi/2}/\sqrt{2} = e^{i\pi/2}/2$ . Так, що повна амплітуда ймовірності потрапити в  $D_1$  дорівнює:

$$A_1 = \frac{e^{i\pi/2}}{2} + \frac{e^{i\pi/2}}{2} = e^{i\pi/2}, \quad (8.13)$$

а ймовірність  $|A_1|^2 = 1$ , тобто частинка завжди потрапляє в детектор  $D_1$ .

А тепер поставимо на обох шляхах фотона “зсувачі” фаз  $\Phi_0$  і  $\Phi_1$  (рис. 1.34) і отримаємо пристрій, який і є *однокубітовим комп'ютером*.

Розглянемо принцип дії такого комп'ютера.

Розрахуємо амплітуди  $A_0$  та  $A_1$ , як і в (8.12), (8.13):

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi/2} e^{i\varphi_1} e^{i\pi/2} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi_0} e^{i\pi/2} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} e^{i\varphi_0} (1 - e^{i\varphi}),$$

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi/2} e^{i\varphi_1} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi_0} e^{i\pi/2} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{e^{i(\pi/2+\varphi_0)}}{2} (1 + e^{i\varphi}), \quad (8.14)$$

$$\varphi = \varphi_1 - \varphi_0.$$

Покладемо: різниця фаз  $\varphi$  (8.14) може набувати значень 0 або  $\pi$ , тобто  $\varphi_0 = 0, \pi$  та  $\varphi_1 = 0, \pi$ .

Якщо фази є однаковими, то  $\varphi=0$ , а відповідно до (8.14):

$$A_0=0, \quad A_1 = e^{i(\pi/2+\varphi_0)},$$

тобто спрацьовує детектор  $D_1$ :  $|A_0|=0$ ,  $|A_1|=1$ .

Якщо фази різні:  $\varphi = \pm\pi$ , то:

$$A_0 = e^{i\pi/2}, \quad A_1 = 0,$$

тобто спрацьовує детектор  $D_0$ :  $|A_0|=1$ ,  $|A_1|=0$ .

*Маємо обчислювальну машину, яка порівнює фази, причому цей пристрій виконує лише одну дію – запуск фотона, і маємо результат. Тоді як обчислення на класичному комп'ютері вимагає дві дії: потрібно взяти різницю фаз і потім порівняти її з нулем.*

Наш квантовий комп'ютер, завдяки *квантовому паралелізму* (він додає амплітуди двох шляхів), виконує лише одну дію і визначає різницю фаз. Саме вона є відповідальною за інтерференцію, а не самі фази. Зауважимо, що ця задача є спрощеним варіантом так званої задачі Дойча<sup>1</sup>.

Замість фотона можна взяти, наприклад, електрон, що дифрагує на двох щілинах, і магнітним полем змінювати фазу (ефект Ааронова – Бома<sup>2</sup>).

<sup>1</sup>[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%BB%D0%B3%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%82%D0%BC%D0%94%D0%BE%D0%B9%D1%87%D0%B0\\_%E2%80%94%D0%99%D0%BE%D0%B6%D0%B8](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%BB%D0%B3%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%82%D0%BC%D0%94%D0%BE%D0%B9%D1%87%D0%B0_%E2%80%94%D0%99%D0%BE%D0%B6%D0%B8)

<sup>2</sup>[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%95%D1%84%D0%B5%D0%BA%D1%82\\_%D0%90%D0%B0%D1%80%D0%BE%D0%BD%D0%BE%D0%B2%D0%B0\\_%E2%80%94%D0%91%D0%BE%D0%BC%D0%B0](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%95%D1%84%D0%B5%D0%BA%D1%82_%D0%90%D0%B0%D1%80%D0%BE%D0%BD%D0%BE%D0%B2%D0%B0_%E2%80%94%D0%91%D0%BE%D0%BC%D0%B0)

### 8.1.2. Квантовий процесор та квантові мережі

З окремих кубітів і одно- та двокубітових логічних елементів будують так звану квантову мережу, яка змінює стани квантового регістру – це все разом і утворює *квантовий процесор*. Двокубітовий логічний елемент, очевидно, є вже матрицею “4×4” і, наприклад, оператор “виключаючи або” (*XOR* «*exclusive or*») дорівнює:

$$X\hat{O}R = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_x \end{pmatrix}, \quad (8.15)$$

де  $I$  – одинична матриця “2×2”,  $\hat{\sigma}_x$  – матриця Паулі<sup>3</sup>. Матриці Паулі – три “2×2” матриці – оператори спіну для частинок зі спіном 1/2:

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad -\sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad -\sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Звичайним множенням можна отримати:

$$\begin{aligned} X\hat{O}R|00\rangle &= |00\rangle, & X\hat{O}R|01\rangle &= |01\rangle, \\ X\hat{O}R|10\rangle &= |11\rangle, & X\hat{O}R|11\rangle &= |10\rangle. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Отже, якщо перший кубіт є  $|0\rangle$  (8.1), то оператор  $X\hat{O}R$  не змінює двокубітового стану, але якщо перший кубіт є  $|1\rangle$  (8.1), то оператор  $X\hat{O}R$  змінює стан другого кубіта – зі стану  $|0\rangle$  переводить його в  $|1\rangle$  і навпаки.

Квантове обчислення є еволюцією квантового регістру під дією унітарних операторів квантової мережі, що задають потрібну програму розрахунку. Найбільшою проблемою є приготування початкового стану і “зчитування” кінцевого стану (тобто результату). “Зчитування” означає вимірювання, яке руйнує стан унаслідок редукції хвильової функції. Для того, щоб вилучити з кінцевого стану всю інформацію, потрібно після кожного “зчитування” відтворювати цю хвильову функцію.

Таким чином, отримати результати можна лише зі статистичного аналізу при багатократному вимірюванні, тобто при багатократному повторенні роботи квантового комп’ютера. Але, як ми бачили, найбільшою перевагою квантового комп’ютера є його надфективність: для окремих

<sup>3</sup>[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B0%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%86%D1%96\\_%D0%9F%D0%B0%D1%83%D0%BB%D1%96](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B0%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%86%D1%96_%D0%9F%D0%B0%D1%83%D0%BB%D1%96)

задач час розрахунку на квантовому комп'ютері пропорційний до степеню від кількості необхідних елементарних операцій, а на класичному – експоненті.

### **8.1.3. Реалізація кубітів**

Існує кілька фізичних реалізацій кубітів, кожна з яких має свої переваги та недоліки:

- **Надпровідникові кубіти.**

Реалізуються за допомогою надпровідникових схем при дуже низьких температурах. Є однією з найпоширеніших технологій для сучасних квантових комп'ютерів.

- **Іонні пастки.**

Використовують іони, утримувані в електромагнітних пастках. Квантова інформація кодується в енергетичних рівнях іонів.

- **Фотонні кубіти.**

Використовують поляризацію або інші властивості фотонів для кодування квантової інформації.

- **Квантові точки.**

Маленькі напівпровідникові частинки, які можуть утримувати електрони і використовувати їхні спінові стани для кодування інформації.

- **Спінові кубіти.**

Використовують спін електронів або атомних ядер для кодування квантової інформації.

Кожна з цих реалізацій має свої виклики щодо стабільності, контрольованості та масштабованості, але всі вони активно досліджуються і розвиваються для створення ефективних квантових комп'ютерів.

## **8.2. Квантова криптографія**

**Криптографія** – це наука про збереження таємниці змісту деякого тексту за допомогою процедури шифрування. Криптографія є одним із розділів криптології, яка охоплює також і криптоаналіз, тобто науку проникнення в таємницю захищеного змісту.

Надефективність квантового комп'ютера засмутила любителів обмінюватись конфіденційною інформацією в зашифрованому вигляді. Річ у тім, що надійність шифру є в оберненій залежності від швидкодії комп'ютера. Мова йде про надійність в обчислювальному сенсі, тобто

розкриття шифру в принципі є можливим, однак на це потрібен час, після якого інформація перестає бути таємною. Інший характер надійності полягає в тому, що без ключа не можна відтворити з криптотексту змісту повідомлення. Таким є так званий шифр одноразового блокнота – назва походить від того, що копії ключів записані на сторінках блокнота, і як тільки ключ використано, ця сторінка знищується.

Прикладом криптографії з відкритим ключем є RSA-код, запропонований 1977 року (назва пішла від перших літер прізвищ його авторів Р. Rivest, А. Shamir, А. Adleman).

### *Код працює так.*

Два шифрувальника вибирають два досить великі прості числа  $p$  та  $q$  і обчислюють добуток  $N = p \cdot q$ . Потім випадковим чином вибирають натуральне число  $e$ , взаємно просте з числом  $(p-1)(q-1)$  і менше за нього, тобто найбільший спільний дільник для цих чисел дорівнює одиниці. Після цього знаходять натуральне число  $d$ , обернене до  $e$  в тому сенсі, що залишок від ділення числа  $ed$  на  $(p-1)(q-1)$  дорівнює одиниці. У теорії чисел кажуть, що залишок числа  $ed$  за модулем  $(p-1)(q-1)$  дорівнює одиниці, і пишуть це так:  $ed \equiv 1 \pmod{(p-1)(q-1)}$ . Тепер  $(e, N)$  – це відкритий ключ,  $d$  – таємний.

Далі перший шифрувальник пише лист другому, користуючись відкритим ключем. Спочатку він кожен літеру тексту переводить у деяку послідовність чисел, потім кожне з цих чисел  $n$  зашифровує, замінюючи його на лишок числа  $ne$  за модулем  $N$ , і відкрито пересилає цей криптотекст. Другий шифрувальник, маючи таємний ключ, кожне число з криптотексту підносить до степеню  $d$  за модулем  $N$  і отримує вихідне число  $n$ , оскільки  $n^{ed} \equiv n \pmod{N}$ . Стороннім особам відомі лише числа  $N$  та  $e$ , а не  $p$  та  $q$ , тобто розклад  $N$  на прості множники є таємницею. І хоча алгоритм розкладу натурального числа на прості множники був відомий ще Евклідові, однак час, потрібний на це, виявляється, дуже швидко зростає зі збільшенням  $N$ , а саме експоненційно до  $N^{1/3}(\ln N)^{2/3}$ . Кількість цього часу і є критерієм надійності шифру (автори RSA-коду запропонували розкласти на множники 129-значне число, відоме тепер як число RSA-129). Лише через 17 років здійснено факторизацію цього числа зусиллями понад 1600 комп'ютерів, об'єднаних у мережу). Найуразливішим місцем такого шифрування є операція обміну таємним ключем. Щоб уникнути цього, перший шифрувальник творить таємний ключ сам, а другий, маючи, як і всі, її відкритий ключ, передає інформацію, яку, крім першого, ніхто не

розшифрує. Між іншим, приватний таємний ключ може слугувати як електронний підпис особи.

Брутальна атака RSA-шифру на квантовому комп'ютері, тобто розклад натурального числа  $N$  на прості множники, із часом розшифровки, пропорційним до степеню  $\ln N$ , робить реальним несанкціонований доступ до інформації, а шифр ненадійним. Але завдяки знову ж таки квантовій механіці виникають інші можливості зробити шифрування надійним.

У ролі квантового шифру можна вибрати сукупність *EPR*-пар частинок. Візьмемо, наприклад, синглетний сплутаний стан системи двох частинок, спіни яких дорівнюють  $\hbar/2$ , а повний спін дорівнює нулеві. Перший шифрувальник, вимірюючи поляризатором у точці  $A$  спинові стани частинок із кожної *EPR*-пари, отримує послідовність із нулів (спін “вгору”) і одиниць (спін “донизу”), а другий – у точці  $B$  зчитує зі свого поляризатора доповнюючу послідовність одиниць і нулів від інших частинок відповідних *EPR*-пар. Ця цілком випадкова послідовність символів і є шифром, яким шифрувальники обмінялись під час своїх вимірів. Далі перший шифрувальник, наприклад, додаючи числа з цієї випадкової послідовності до відповідних цифр із послідовності відкритого тексту, що необхідно передати, отримує шифрований текст. Другий легко відтворює початковий текст прийнятого від першого повідомлення операцією віднімання шифру від крипто-тексту.

*Несанкціоноване втручання у квантовий канал EPR-пар під час творення шифру приводить до незворотної редукції хвильової функції EPR-пари та руйнування шифру.* Для того щоб не руйнувати стани фотонів, потрібно робити їхні копії, тобто клонувати ці стани (назва клон походить від грецького  $\chi\lambda\omega\nu$  – паросток, пагін). Під клонуванням розуміють створення точної копії вихідного квантового об'єкта при збереженні його в тому початково невідомому стані, у якому він був до клонування. Це, однак, заборонено так званою теоремою про неможливість клонування, яка є наслідком квантово-механічного принципу суперпозиції. Справді, нехай пристрій для клонування переводить амплітуду деякого стану об'єкта в добуток амплітуд (об'єкта та копії). Якщо маємо суперпозиційний стан об'єкта, наприклад, із двох амплітуд, то, з одного боку, лінійний оператор клонування переводить цей стан у суму добутків амплітуд, а з іншого – ми повинні мати, за означенням, добуток суперпозиційних станів. Оскільки сума добутків не дорівнює добуткові суми, то звідси випливає, що операція клонування квантово-механічних станів є неможливою. Отже, кожна спроба

“підслухати” інформацію, якою обманюються два шифрувальники, доконечно тягне за собою спотворення станів фотонів.

### **8.3. Квантове обладнання. Призначення квантових комп'ютерів**

#### **Проблеми квантових комп'ютерів**

Квантові комп'ютери мають потенціал значно перевершити класичні комп'ютери в таких задачах, як факторизація великих чисел, симуляція квантових систем і оптимізаційні проблеми. Однак, створення стабільних і масштабованих квантових комп'ютерів залишається серйозним технічним викликом.

**8.3.1. Квантове обладнання** є комплексом пристроїв і технологій, необхідних для створення, маніпулювання та вимірювання квантових станів.

Основними компонентами квантового обладнання є:

#### **1. Квантові процесори.**

- *Кубіти:* фізичні реалізації кубітів можуть бути різними, включаючи надпровідникові кубіти, іонні пастки, фотонні кубіти та квантові точки. Кожен тип кубіта має свої переваги та недоліки в стабільності, тривалості життя та легкості маніпулювання.

#### **2. Кріогенні системи.**

- *Охолоджувальні системи:* більшість квантових комп'ютерів, особливо надпровідникові кубіти, працюють при надзвичайно низьких температурах (близько абсолютного нуля). Для цього використовуються кріогенні охолоджувачі та розведені холодильники.

#### **3. Контрольна електроніка.**

- *Генератори імпульсів:* для маніпулювання кубітами потрібні високоточні мікрохвильові імпульси.
- *Цифрові аналогові перетворювачі (DAC):* ці пристрої перетворюють цифрові сигнали в аналогові для керування кубітами.
- *Контрольні системи:* комплекси електроніки для генерації та подачі необхідних сигналів і полів до кубітів.

#### **4. Оптичні системи.**

- *Лазери та детектори:* для квантових обчислень з використанням фотонів. Лазери створюють фотони, а детектори вимірюють їх.

- *Оптичні волокна:* використовуються для транспортування фотонів між різними частинами квантового комп'ютера або між квантовими комп'ютерами.

## **5. Іонні пастки.**

- *Вакуумні камери:* іонні пастки потребують вакуумного середовища для утримання іонів без перешкод.
- *Лазери для охолодження:* використовуються для охолодження іонів до близьких до абсолютного нуля температур.
- *Радіочастотні та статичні електричні поля:* використовуються для утримання та маніпулювання іонами.

## **6. Декогеренційний захист.**

- *Екрани та фільтри:* захист від електромагнітних перешкод, щоб мінімізувати декогеренцію квантових станів.
- *Квантова корекція помилок:* алгоритми та технології для виявлення та виправлення помилок у квантових обчисленнях.

## **7. Програмне забезпечення.**

- *Квантові компілятори:* програми, які переводять алгоритми високого рівня в квантові гейти.
- *Симулятори квантових комп'ютерів:* використовуються для тестування та валідації квантових алгоритмів на класичних комп'ютерах.

## **8. Мережеве обладнання.**

- *Квантові повторювачі:* використовуються для передачі квантової інформації на великі відстані.
- *Квантові криптографічні системи:* забезпечують безпечну передачу даних, використовуючи принципи квантової механіки.

Квантове обладнання є ще на стадії розвитку, і кожен компонент потребує постійного вдосконалення та оптимізації. Проте вже зараз воно демонструє значний потенціал для революційних змін у різних галузях науки і техніки.

### **8.3.2. Призначення квантових комп'ютерів**

Квантові комп'ютери мають потенціал революціонізувати багато галузей завдяки своїй здатності виконувати складні обчислення значно швидше, ніж класичні комп'ютери.

Основні призначення квантових комп'ютерів:

#### **1. Криптографія.**

- ✓ *Злом сучасних криптосистем:* квантові комп'ютери можуть ефективно розкласти великі числа на прості множники, що загрожує безпеці сучасних криптографічних алгоритмів, таких як RSA.
- ✓ *Квантова криптографія:* використання квантових принципів для створення абсолютно безпечних систем передачі даних.

## **2. Моделювання молекул і матеріалів**

- ✓ *Хімічні реакції:* квантові комп'ютери можуть точно моделювати складні хімічні реакції, що важко або неможливо для класичних комп'ютерів.
- ✓ *Розробка нових матеріалів:* симуляція властивостей нових матеріалів на квантовому рівні для прискорення їх розробки.

## **3. Оптимізація.**

- ✓ *Логістика та транспортування:* розв'язання складних задач оптимізації, таких як планування маршрутів та розподіл ресурсів.
- ✓ *Фінанси:* оптимізація портфелів, управління ризиками та алгоритмічна торгівля.

## **4. Штучний інтелект і машинне навчання.**

- ✓ *Швидкі обчислення:* Прискорення алгоритмів машинного навчання через швидші обчислення.
- ✓ *Обробка великих обсягів даних:* Квантові комп'ютери можуть обробляти великі набори даних ефективніше.

## **5. Фізичні симуляції**

- ✓ *Космологія:* Моделювання складних фізичних систем, таких як еволюція всесвіту.
- ✓ *Біологія:* Дослідження складних біологічних процесів на молекулярному рівні.

### **8.3.3. Проблеми квантових комп'ютерів**

#### **1. Декогеренція і шум.**

- *Чутливість до зовнішніх впливів:* квантові системи дуже чутливі до зовнішніх електромагнітних полів, тепла та інших видів шуму, що призводить до втрати квантової інформації (декогеренції).
- *Корекція помилок:* необхідність розробки ефективних методів корекції помилок для стабілізації квантових обчислень.

#### **2. Масштабованість.**

- *Збільшення кількості кубітів:* потрібно створити квантові комп'ютери з великою кількістю стабільних кубітів для виконання практичних завдань.

- *Квантові зв'язки:* забезпечення надійного з'єднання між кубітами на великих відстанях.

### **3. Температурні умови.**

- *Кріогенне охолодження:* більшість квантових комп'ютерів потребують надзвичайно низьких температур, що ускладнює їх експлуатацію та збільшує витрати.

### **4. Інтерфейси та контроль.**

- *Складність управління:* розробка точних та ефективних способів управління і маніпуляції кубітами.
- *Контрольна електроніка:* необхідність створення складних електронних систем для керування квантовими процесорами.

### **5. Теоретичні виклики.**

- *Розробка алгоритмів:* потрібні нові квантові алгоритми, які зможуть ефективно використовувати можливості квантових комп'ютерів.
- *Комплексність проблеми:* багато завдань ще не мають квантових алгоритмічних рішень, які перевершують класичні підходи.

### **6. Вартість.**

- *Висока ціна:* створення та експлуатація квантових комп'ютерів вимагає значних фінансових витрат, що обмежує їх доступність для багатьох організацій.

Попри ці проблеми, прогрес у квантових обчисленнях продовжується, і багато дослідників вірять, що ці виклики можна подолати, відкривши нові горизонти для науки і техніки.

## **Контрольні запитання до лекції 8**

1. Які основні принципи роботи квантового комп'ютера відрізняють його від класичного?
2. Що таке кубіт, і як він реалізується у квантових обчисленнях?
3. Яку роль відіграють оператори в однокубітовому квантовому комп'ютері?
4. Як працює квантовий процесор, і що таке квантові мережі?
5. Які фізичні системи використовуються для реалізації кубітів?
6. У чому переваги квантової криптографії над класичною криптографією?
7. Що таке протокол квантового розподілу ключів (наприклад, BB84)?

8. Як принцип невизначеності Гайзенберга використовується в квантовій криптографії?
9. Які основні компоненти квантового обладнання потрібні для роботи квантового комп'ютера?
10. Які основні виклики та проблеми стоять перед розробниками квантових комп'ютерів?

## **Список літератури**

1. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — 4-те вид., доп. — Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. — 872 с.: 78 іл.  
<http://www.ktf.franko.lviv.ua/books/QM4/QM4.pdf>
2. Теоретична фізика. Квантова механіка [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» / О. М. Бродин; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 2.6 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 233 с.  
[https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/48871/1/Teoretychna\\_fizyka\\_Kvanto\\_va\\_mekhanika.pdf](https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/48871/1/Teoretychna_fizyka_Kvanto_va_mekhanika.pdf)
3. Фізичний практикум із застосуванням пакету Excel. Навчальний посібник / Азнаурян І.О та ін.; за заг. ред. Азнаурян І.О. – К.: КНУБА, 2023. – 188 с.  
<https://org2.knuba.edu.ua/mod/folder/view.php?id=29051>
4. Physics: Excel-Based Laboratory Manual. Panova O, Aznauryan I and others – Kyiv; KNUCA, 2020. – 108 p.  
<https://org2.knuba.edu.ua/mod/folder/view.php?id=29051>
5. Лабораторний практикум з атомної і ядерної фізики . Білюк А.І. – Вінниця: ВДПУ, 2011 р. – 97с.  
<https://library.vspu.net/jspui/bitstream/123456789/2889/1/%D0%9B%D0%9F-%D0%90%D1%96%D0%AF%D0%A4.pdf>

## Зміст

Передмова.....	3 -
.....	3 -
Вступ .....	4 -
<b>Лекція 1. ....</b>	<b>7 -</b>
1.1.    Теплове випромінювання.....	7 -
1.2.    Закони М. Планка .....	11 -
1.3.    Підтвердження теорії М. Планка .....	18 -
<b>Лекція 2.....</b>	<b>21 -</b>
2.1.    Атомні спектри. Борівська модель атома гідрогену. Момент кількості руху.....	21 -
2.2.    Хвилі матерії.....	24 -
2.3.    Дифракція частинок.....	26 -
2.4.    Хвильова функція .....	28 -
<b>Контрольні запитання до лекції 2 .....</b>	<b>33 -</b>
<b>Лекція 3.....</b>	<b>34 -</b>
3.1.    Принцип невизначеності Гайзенберга.....	34 -
3.2.    Приклади застосування співвідношення невизначеностей Гайзенберга.....	40 -
<b>Контрольні запитання до лекції 3 .....</b>	<b>42 -</b>
<b>Лекція 4.....</b>	<b>43 -</b>
4.1.    Рівняння Шрödінгера .....	43 -
4.2.    Частинка в одновимірному потенціальному ящику.....	46 -
4.3.    Частинка в тривимірному потенціальному ящику.....	52 -
4.4.    Лінійний гармонічний осцилятор.....	56 -
4.5.    Тунельний ефект .....	61 -
<b>Контрольні запитання до лекції 4 .....</b>	<b>65 -</b>
<b>Лекція 5.....</b>	<b>66 -</b>
5.1.    Квантові числа.....	66 -
5.2.    Інтерпретація квантування моменту імпульсу. ....	71 -
5.3.    Виродження енергетичних рівнів .....	74 -
5.4.    Розподіл електронної густини в атомі гідрогену.....	75 -
5.5.    Орбітальний магнітний момент електрона.....	77 -
<b>Контрольні запитання до лекції 5 .....</b>	<b>79 -</b>
<b>Лекція 6.....</b>	<b>80 -</b>

6.1. Атом гідрогену у зовнішньому магнітному полі. Ефект Зеемана	- 80 -
6.2. Досліди Штерна та Герлаха (1922 р.)	- 83 -
6.3. Дослід Айнштейна – де-Гааза	- 85 -
6.4. Спін електрона	- 86 -
<b>Контрольні запитання до лекції 6</b>	<b>- 92 -</b>
<b>Лекція 7</b>	<b>- 93 -</b>
7.1. Парадокси квантової механіки	- 93 -
7.2. Основи квантової інформації	- 96 -
<b>Контрольні запитання до лекції 7</b>	<b>- 113 -</b>
<b>Лекція 8</b>	<b>- 114 -</b>
8.1. Основні принципи роботи квантових комп'ютерів	- 114 -
8.2. Квантова криптографія	- 121 -
8.3. Квантове обладнання. Призначення квантових комп'ютерів Проблеми квантових комп'ютерів	- 124 -
<b>Контрольні запитання до лекції 8</b>	<b>- 127 -</b>
<b>Список літератури</b>	<b>- 128 -</b>

Навчальне видання

**АЗНАУРЯН Ірина Олександрівна**

**ФІЗИЧНІ ОСНОВИ  
КВАНТОВИХ КОМП'ЮТЕРІВ**

Конспект лекцій

Комп'ютерне верстання *А. П. Селівестрової*

Ум. друк. арк. 7,67. Обл.-вид. арк. 8,25  
Електронний документ. Вид № 49/V-25.

Виконавець і виготовлювач

Київський національний університет будівництва і архітектури  
Проспект Повітряних Сил, 31, Київ, Україна, 03680

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру суб'єктів  
видавничої справи ДК № 808 від 13.02.2002 р