Министерство образования и науки российской федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Национальный минерально-сырьевой университет «горный»

Кафедра общей и технической физики

ФИЗИКА
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Методические указания к расчётно-графическим работам и варианты заданий для студентов бакалавриата направления 220700

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
2013

УДК 530 (075.83)

Физика. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. Методические указания к расчётно-графическим работам и варианты заданий для студентов бакалавриата направления 220700. / Национальный минерально-сырьевой университет «Горный». Сост. *Т.В. Стоянова*. СПб, 2013. 27 с.

Расчётно-графические работы предназначены для студентов бакалавриата направления подготовки 220700 национального минерально-сырьевого горного университета. Выполняются индивидуально в соответствии с вариантом.

Табл. 2. Ил. 8. Библ. 3 Прил. 1

Научный редактор: А.С. Мустафаев

РЕКОМЕНДАЦИИ К ВЫПОЛНЕНИЮ РАСЧЁТНО-ГРАФИЧЕСКОЙ РАБОТЫ

Вопросы и задачи, содержащиеся в пособии, охватывают большую часть стандартного курса квантовой механики, изучаемого в технических вузах, и способствуют более глубокому усвоению теоретического материала данного раздела.

Выполнение расчётно-графической работы предполагает достаточно большой объём самостоятельной работы студента.

Перед выполнением расчётно-графической работы рекомендуется изучить лекционный курс на тему «элементы квантовой механики» и познакомиться с соответствующим разделом учебника общего курса физики. Если при самостоятельном изучении теоретического материала возникли вопросы, желательно обсудить их на практических занятиях, но если и после этого остались не ясные моменты, можно получить индивидуальную консультацию преподавателя, ведущего расчётно-графическую работу или лектора.

При изучении физического явления, прежде всего, необходимо выяснить сущность явления, условия при которых оно возможно, определить с помощью каких физических величин, оно характеризуется. Желательно понять, как оно связано с другими явлениями и возможности его применения на практике. При определении физической величины важно обратить внимание на то, какая это величина – скалярная или векторная, какие свойства она характеризует, выяснить её размерность и формулу, определяющую связь с другими физическими величинами. При прочтении закона обратите внимание на границы его применения, определите, между какими явлениями он выражает связь, уточните формулировку и математическое выражение закона.

Расчётно-графическая работа оформляется на компьютере. Прежде чем приступить к выполнению практической части расчётно-графической работы необходимо ознакомиться с требованиями, размещенными на сайте Горного университета. На титульном листе указать: название института, наименование дисциплины, название работы, фамилию и инициалы студента и ведущего расчётно-графическое задание преподавателя, год выполнения работы.

Необходимо полностью переписать задачу своего варианта, а заданные физические величины выписать отдельно, при этом все числовые значения должны быть переведены в одну систему единиц. При получении расчётной формулы приведите её полный подробный вывод.

Математическое решение должно сопровождаться пояснениями, а в случае необходимости его можно продемонстрировать рисунком. Задачу рекомендуется решить сначала в общем виде (в буквенных обозначениях), поясняя применяемые при написании формул буквенные обозначения, и только после проверки размерности искомой физической величины, подставить в выведенную формулу числовые значения. Все необходимые числовые значения величин должны быть выражены в системе «СИ». После получения окончательного результата, для удобства построения графических зависимостей, можно перейти к внесистемным единицам. Например, выразить энергию в электрон-вольтах.

Перед построением графиков необходимо получить аналитическое выражение функциональной зависимости. Выбрать удобный масштаб и указать его на осях координат, а так же физические величины и единицы измерения.

На координатную плоскость обязательно должны быть нанесены экспериментальные точки. Кривая, аппроксимирующая функциональную теоретическую зависимость строится в соответствии с методом наименьших квадратов.

СОДЕРЖАНИЕ ОТЧЁТА

1. Титульный лист
2. Теоретическая часть:

2.1. Определения всех физических явлений, законов и величин, встречающихся в данной работе.

2.2. Основные расчётные формулы с пояснениями.

3. Расчётная часть:

3.1. Задание с исходными данными своего варианта.
3.2. Расчёт с пояснениями
3.3. Графики.
3.4. Анализ результатов. Заключение.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Уравнение Шредингера - основное уравнение нерелятивистской квантовой механики является уравнением относительно волновой функции.

Для описания распределения вероятности нахождения частицы в данный момент времени в некоторой точке пространства, вводят волновую функцию (или пси-функцию) - $\psi(x,y,z,t)$.

Физический смысл имеет не сама волновая функция, а квадрат её модуля: $|\psi|^2=\psi\psi^*$, где ψ^* - функция, комплексно сопряжённая с самой волновой функцией. $|\psi|^2$ - плотность вероятности, определяющая вероятность пребывания электрона в данной точке пространства:

$$\rho_w = \frac{dw}{dV} = |\psi|^2 .$$

Вероятность dw того, что частица находится в элементе объёма dV, равняется произведению квадрата модуля волновой функции $|\psi|^2$ и элемента объёма dV:

$$dw = |\psi|^2 \cdot dV = |\psi|^2 \cdot dx \cdot dy \cdot dz .$$

Волновая функция удовлетворяет условию нормировки вероятностей:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dxdydz = 1 \qquad (1)$$

это означает, что пребывание частицы где-либо в пространстве, есть достоверное событие и его вероятность равна 1.

Основные свойства волновой функции:
1) функция конечна (вероятность не может быть больше 1); однозначна (вероятность не может быть не однозначной величиной); непрерывна (вероятность не может изменяться скачком).
2) производные $\frac{\partial \psi}{\partial X}, \frac{\partial \psi}{\partial Y}, \frac{\partial \psi}{\partial Z}, \frac{\partial \psi}{\partial t}$ должны быть непрерывны;
3) функция $|\psi|^2$ должна быть интегрируема, т.е. интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dxdydz,$$

должен быть конечным.

Уравнение Шредингера - не выводится, а постулируется из оптико-механической аналогии и имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad (2)$$

где m - масса частицы, $\nabla^2 = \Delta$ - оператор Лапласа, i - мнимая единица.

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}.$$

Градиент функции U, взятый с обратным знаком, определяет силу, действующую на частицу. Это уравнение часто называют временным, так как оно содержит производную по времени.

При условии, что поле, в котором движется частица стационарно – U - потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором частица движется. В этом случае решение уравнения Шредингера можно разделить на два множителя: первый - зависит только от координат, второй - зависит только от времени.

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\cdot e^{-i(E/\hbar)t}, \qquad (3)$$

где E – полная энергия частицы в стационарном поле. E = const.
Подставим (3) в (2), тогда:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i(E/\hbar)t}\Delta\psi + U\psi e^{-i(E/\hbar)t} = i\hbar(-i\frac{E}{\hbar})\psi e^{-i(E/\hbar)t}.$$

Сократив, это уравнение на общий множитель $e^{-i(E/\hbar)t}$ получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi .$$

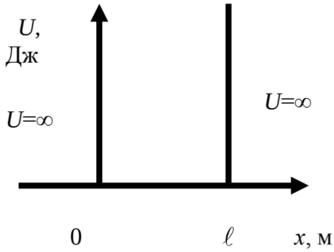

Рис. 1. Квантовая яма

Полученное уравнение называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. Если перенести $E\psi$ в левую часть и разделить его на $-\frac{2m}{\hbar^2}$, то получим уравнение в виде:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0, \qquad (4)$$

где E - полная энергия частицы, U - потенциальная энергия (силовое поле в котором движется частица, не зависящее от времени).

Функции ψ, удовлетворяющие уравнению Шредингера при данном U, называются собственными функциями.

Значения E, при которых существуют решения уравнения Шредингера, называются собственными значениями.
Совокупность собственных значений называется спектром величины.

Квантование энергии

В случае дискретного спектра, собственные значения и собственные функции можно пронумеровать:

$$E_1, \quad E_2, \; E_3, \quad E_n,$$

$$\psi_{1,} \quad \psi_{2,} \quad \psi_{3,} \quad \psi_{n,}$$

Найдём собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для более простого случая - для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

Пусть частица движется вдоль оси x, а её движение ограничено непроницаемыми стенками с координатами 0 и ℓ.

Тогда потенциальная энергия U равна нулю при $0 \le x \le \ell$ и обращается в бесконечность при $x < 0$ и $x > \ell$.

Так как волновая функция зависит только от координаты x, то стационарное уравнение Шредингера можно взять в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 .$$

Вероятность обнаружения частицы вне ямы равна нулю и значение волновой функции за пределами ямы равно нулю:

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0 . \tag{5}$$

В области $0 \le x \le \ell$ уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 ,$$

так как $U = 0$. Пусть:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E , \tag{6}$$

тогда это уравнение можно записать в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 .$$

Это уравнение известно из теории колебаний и его решение имеет вид:

$$\psi(x) = a\sin(kx + \alpha)\,. \tag{7}$$

Условия (5) выполняются при соответствующих k и α. Из условия $\psi(0) = 0$ получаем:

$$\psi(0) = a\sin\alpha = 0\,.$$

Следовательно, α = 0. Из условия $\psi(\ell) = a\sin k\ell = 0$ следует, что

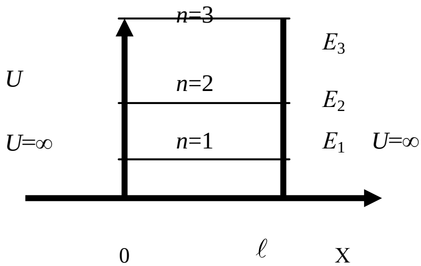

Рис 2. Квантование энергии

$$k\ell = \pm\pi n\,, \tag{8}$$

где n = 1, 2, 3. Если n = 0, то получается, что частица нигде не находится, поэтому этого не может быть. Исключив k из уравнений (6) и (8), найдём собственные значения энергии частицы:

$$k = \pm\frac{\pi n}{\ell} \qquad k^2 = \pm\frac{\pi^2 n^2}{\ell^2} \qquad \frac{2m}{\hbar^2}E = \pm\frac{\pi^2 n^2}{\ell^2}\,,$$

тогда энергия частицы в квантовой яме:

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \;\; (n=1,2,3,\ldots,),$$

где ℓ - ширина квантовой ямы, а n - квантовое число, определяющее квантовые уровни частицы.

Разность энергий двух соседних уровней равна:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2}n\,.$$

При больших квантовых числах выводы и результаты квантовой механики соответствуют классическим результатам.

Подставив в (7) k полученное из (8), найдём собственные значения функции задачи:

$$\psi_n(x) = a \sin \frac{n\pi x}{\ell}$$

Для нахождения a воспользуемся условием нормировки:

$$a^2 \int_0^{\ell} \sin^2 \frac{n\pi x}{\ell} dx = 1,$$

$$a^2 \int_0^{\ell} \frac{1}{2}(1 - \cos\frac{2\pi n}{\ell})dx = a^2 \int_0^{\ell} \frac{1}{2} dx - \frac{1}{2}\int_0^{\ell} a^2 \cos\frac{2\pi n}{\ell} x dx = a^2 \ell \frac{1}{2} = 1.$$

Тогда получим: $a^2\left(\frac{1}{2}\right)\ell = 1$, $a = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$ и собственная функция имеет вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi x}{\ell}, \quad (n=1,2,3,\ldots). \tag{9}$$

Среднее значение координаты определяется: $\langle x \rangle = \int_{x_1}^{x_2} \psi^* x \psi dx$.

Подставим (9) в это уравнение:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{\ell}\int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{n\pi x}{\ell} \cdot x \cdot dx = \frac{2}{\ell} \cdot \frac{1}{2}\int_{x_1}^{x_2} (1 - \cos\frac{2n\pi x}{\ell}) \cdot x \cdot dx =$$

$$= \frac{1}{\ell}\int_{x_1}^{x_2} x dx - \frac{1}{\ell}\int_{x_1}^{x_2} \cos\frac{2n\pi x}{\ell} \cdot x \cdot dx = (*)$$

$$\frac{1}{\ell} \cdot \int_{x_1}^{x_2} \cos\frac{2n\pi x}{\ell} \cdot x \cdot dx = \begin{bmatrix} u = x,\ du = dx; & \upsilon = \int \cos\frac{2n\pi x}{\ell} dx = \\ d\upsilon = \cos\frac{2n\pi x}{\ell} dx, & = \frac{\ell}{2n\pi} \sin\frac{2n\pi x}{\ell} \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\ell}(x \frac{\ell}{2n\pi} \sin\frac{2\pi n x}{\ell} \Big|_{x_1}^{x_2} - \frac{\ell}{2n\pi}\int_{x_1}^{x_2} \sin\frac{2n\pi}{\ell} dx) =$$

$$= \frac{1}{2n\pi}(x_2 \sin\frac{2\pi n x_2}{\ell} - x_1 \sin\frac{2\pi n x_1}{\ell}) + \frac{\ell}{4n^2\pi^2}(\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_2 - \cos\frac{2n\pi}{\ell}x_1);$$

$$(*) = \langle x \rangle = \frac{1}{2\ell}(x_2^2 - x_2^2) - \frac{1}{2n\pi}(x_2 \sin\frac{2\pi n x_2}{\ell} - x_1 \sin\frac{2\pi n x_1}{\ell}) -$$

$$-\frac{\ell}{4n^2\pi^2}(\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_2 - \cos\frac{2n\pi}{\ell}x_1).$$

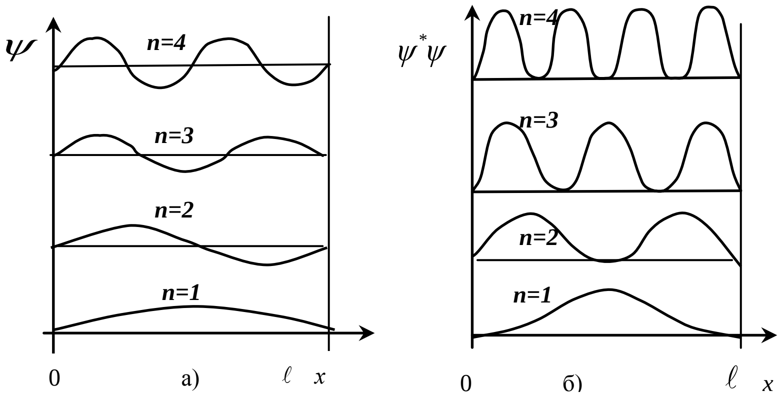

Рис. 3. Графики а) собственных функций, б) плотности вероятностей

Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер

Пусть U_0 – высота потенциального барьера, а ℓ - ширина. Частица движется свободно слева направо. В квантовой механике, если энергия частицы E больше высоты барьера, то частица может свободно пройти над барьером, а может отразиться от барьера и полететь в обратную сторону. На участке $0 \le x \le \ell$ она уменьшает скорость.

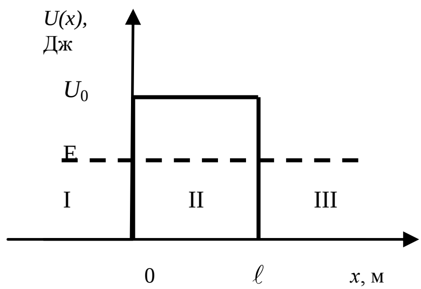

Рис. 4. Потенциальный барьер

При $x > \ell$ скорость частицы снова принимает первоначальное значение. Если $E < U_0$, то частица отражается от барьера и летит в противоположную сторону, но существует вероятность прохождения частицы сквозь барьер и попадания в область $x > \ell$. Это вытекает из уравнения Шрёдингера.

Пусть $E < U_0$, тогда уравнение Шредингера можно записать для областей I и III:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (10),$$

для области II:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \qquad (11)$$

Здесь $E - U_0 < 0$. Найдём решение уравнения (10) в виде: $\psi = e^{\lambda x}$:

- для области II:

$$\frac{d^2 e^{\lambda x}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)e^{\lambda x} = 0,$$

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = 0$$

- для областей I и III:

$$\frac{d^2 e^{\lambda x}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}Ee^{\lambda x} = 0,$$

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0.$$

Следовательно: $\lambda = \pm i\alpha$, где: $\alpha = \frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}$. Решения уравнений (10) и (11) имеют вид:

$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}$ - для области I,

$$\psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}$$ - для области III.

Решение вида $e^{i\alpha x}$ соответствует волне, распространяющейся в положительном направлении оси x, а $e^{-i\alpha x}$ - в противоположном направлении. В области III волна проходит слева направо, поэтому B_3=0.

$$\psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}$$ - для области II,

$$\beta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\ .$$

Для непрерывности функции ψ должны выполняться условия:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \text{ и } \psi_2(\ell) = \psi_3(\ell),$$

а для того, чтобы функция не имела изломов (была гладкой):

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \text{ и } \psi_2'(\ell) = \psi_3'(\ell).$$

Следовательно, применив оба условия, получим систему:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \tag{12.1}$$

$$A_2 e^{\beta\ell} + B_2 e^{-\beta\ell} = A_3 e^{i\alpha\ell}, \tag{12.2}$$

$$i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2, \tag{12.3}$$

$$\beta A_2 e^{\beta\ell} - \beta B_2 e^{-\beta\ell} = i\alpha A_3 e^{i\alpha\ell}. \tag{12.4}$$

Разделим эти уравнения на A_1 и введём обозначения:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \qquad b_2 = \frac{B_2}{A_1}, \qquad a_2 = \frac{A_2}{A_1}, \qquad a_3 = \frac{A_3}{A_1},$$

$$n = \frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}\ .$$

Тогда уравнения (12) будут иметь вид:

$$1+b_1=a_2+b_2\,, \tag{13.1}$$
$$a_2e^{\beta\ell}+b_2e^{-\beta\ell}=a_3e^{i\alpha\ell}\,, \tag{13.2}$$
$$i-ib_1=na_2-nb_2\,, \tag{13.3}$$
$$na_2e^{\beta\ell}-nb_2e^{-\beta\ell}=ia_3e^{i\alpha\ell}\,. \tag{13.4}$$

Умножив уравнение (13.1) на мнимую единицу и сложив с уравнением (13.3), получим:

$$2i=(n+i)a_2-(n-i)b_2\ . \tag{14}$$

Умножим уравнение (13.2) системы на мнимую единицу и сложим с уравнением (13.4):

$$(n-i)\exp(\beta\ell)a_2-(n+1)\exp(-\beta\ell)b_2=0\,. \tag{15}$$

Решая совместно уравнения (14) и (15), найдём:

$$a_2=\frac{2i(n+i)\exp(-\beta\ell)}{(n+i)^2\exp(-\beta\ell)-(n-i)^2\exp(\beta\ell)}\,,$$
$$b_2=\frac{2i(n-i)\exp(\beta\ell)}{(n+i)^2\exp(\beta\ell)-(n-i)^2\exp(\beta\ell)}\,.$$

Подставим эти выражения в (13.2):

$$a_3=\frac{4ni\exp(-i\alpha\ell)}{(n+i)^2\exp(-\beta\ell)-(n-i)^2\exp(\beta\ell)}\,.$$

Величина $\beta i=\sqrt{\dfrac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ обычно много больше единицы, поэтому в знаменателе слагаемыми $\exp(-\beta\ell)$ можно пренебречь по сравнению с $\exp(\beta\ell)$.

$$a_3\approx-\frac{4ni\exp(-i\alpha\ell)}{(n-i)^2}\exp(-\beta\ell)\,.$$

Учитывая что $|n-i|=\sqrt{n^2+1}$, получим:

$$D = |a_3|^2 \approx \frac{16n^2}{(n^2+1)^2}\exp(-2\beta\ell).$$

Отношение квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волны определяет вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер и называется коэффициентом прохождения (или коэффициентом прозрачности):

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2.$$

Выражение $\frac{16n^2}{(n^2+1)^2}$ имеет значение порядка единицы, поэтому можно считать:

$$D \approx e^{-2\beta\ell} = \exp[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\cdot\ell].$$

Из этого выражения следует, что вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер зависит от ширины барьера ℓ и от его превышения над E, то есть от U_0-E. Если m или ℓ растёт, то D уменьшается. Для потенциального барьера произвольной формы:

$$D \approx \exp[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U(X) - E)}\cdot dx]$$

При преодолении потенциального барьера частица как бы проходит сквозь туннель в этом барьере, и это явление называют туннельным эффектом

Отношение квадратов модулей амплитуд отражённой и падающей волны определяет вероятность отражения частицы от потенциального барьера и называется коэффициентом отражения:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |b_1|^2 .$$

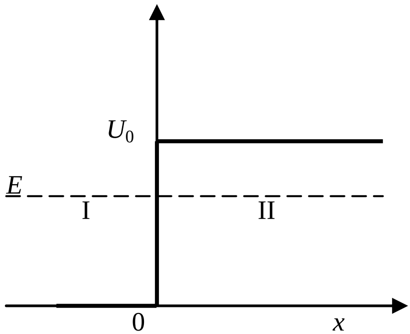

Рис.5. Потенциальный барьер бесконечной ширины

Эти коэффициенты связаны соотношением: $R + D = 1$.

Пусть квантовая частица с энергией E движется в поле прямоугольного барьера (рис.5.) бесконечной ширины и высоты U_0.

Если $E < U_0$, то в стационарном режиме вся энергия падающей волны отражается, однако под ступенькой ($x > 0$) волновая функция не равна нулю, а экспоненциально затухает с ростом координаты x. Это соответствует наличию коэффициента преломления n

$$n = \lambda_1/\lambda_2 = k_2/k_1 , \tag{16}$$

где $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ и $k_2^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$ - волновые числа, соответствующие движению частицы в областях I и II.

Если $U_0 < E$, то частица частично отражается, а частично проходит через барьер. Коэффициент отражения барьера R:

$$R = |(k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)|^2 . \tag{17}$$

Коэффициент пропускания барьера D равен отношению квадратов модулей амплитуд прошедшей волны и падающей.

$$D = 4k_1k_2/(k_1 + k_2)^2 . \tag{18}$$

ЗАДАНИЯ ДЛЯ РАСЧЁТНО-ГРАФИЧЕСКИХ РАБОТ

Электрон находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и шириной ℓ.

1. Волновая функция, описывающая состояние электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид: $\Psi = A\sin k \cdot x$.

Задача 1

1. Определите:

1.1. вид собственной волновой функции $\Psi_n(x)$

1.2. нормировочный коэффициент A.

Напишите собственную волновую функцию с полученным нормировочным коэффициентом A.

Задача 2

2. При заданных квантовых числах n:

2.1. Постройте графики собственных функций (интервал $0 \le x \le \ell$);

2.2. Постройте графики плотности вероятности обнаружения частицы в интервале $0 \le x \le \ell$;

2.3. Найдите собственные значения энергии частицы. Изобразите схематически, в удобном масштабе, энергетические уровни с указанием полученных значений энергии;

2.4. Найдите вероятность пребывания частицы в указанной области (возьмите свой интервал из таблицы 1 вашего варианта);

2.5. Найдите среднее значение координаты частицы в указанной области квантовой ямы (интервал из варианта).

Таблица 1

Для задач 1 и 2

Номер варианта	ℓ, нм	n_1	n_2	интервал
1	4	1	2	$0 < x < \ell/3$
2	2	2	3	$\ell/3 < x < 2\ell/3$

Продолжение таблицы 1

Номер варианта	ℓ, нм	n_1	n_2	интервал
3	3	3	4	$2\ell/3<x<\ell$
4	4	1	3	$0<x<\ell/4$
5	5	1	4	$\ell/4<x<\ell/2$
6	3	2	4	$\ell/2<x<3\ell/4$
7	2	1	2	$3\ell/4<x<\ell$
8	3	2	3	$\ell/3<x<\ell/2$
9	4	3	4	$\ell/4<x<\ell/3$
10	5	1	3	$2\ell/3<x<3\ell/4$
11	2	1	4	$\ell/3<x<3\ell/4$
12	2	2	4	$0<x<3\ell/4$
13	3	1	2	$0<x<\ell/2$
14	4	2	3	$0<x<2\ell/3$
15	5	3	4	$\ell/3<x<\ell$
16	3	1	3	$\ell/4<x<\ell$
17	2	1	4	$\ell/2<x<\ell$
18	3	2	4	$0<x<\ell/3$
19	4	1	2	$\ell/3<x<2\ell/3$
20	5	2	3	$2\ell/3<x<\ell$
21	4	3	4	$0<x<\ell/4$
22	2	1	3	$\ell/4<x<\ell/2$
23	3	1	4	$\ell/2<x<3\ell/4$
24	4	2	4	$3\ell/4<x<\ell$
25	5	1	2	$\ell/3<x<\ell/2$
26	2	2	3	$\ell/4<x<\ell/3$
27	2	3	4	$2\ell/3<x<3\ell/4$
28	3	1	3	$\ell/3<x<3\ell/4$
29	4	1	4	$0<x<3\ell/4$
30	5	2	4	$0<x<2\ell/3$

Задача 3

3. Электрон с энергией E проходит сквозь потенциальный барьер высотой U. Определите вероятность:

3.1. Прохождения частицы сквозь потенциальный барьер;

3.2. Отражения частицы от потенциального барьера;
3.3. Постройте графическую зависимость.

Таблица 2

Для задачи 3

Номер варианта	ℓ, нм	E, эВ	U, эВ	Графическая зависимость
1	4	24	26	$D(\ell)$
2	2	21	24	$D(E)$
3	3	23	24	$D(U)$
4	4	26	30	$D(\ell)$
5	5	38	40	$R(\ell)$
6	3	18	20	$R(E)$
7	2	21	22	$R(U)$
8	3	32	30	$R(\ell)$
9	4	21	23	$D(\ell)$
10	5	38	40	$D(E)$
11	2	33	30	$D(U)$
12	2	29	30	$D(\ell)$
13	3	26	30	$R(\ell)$
14	4	38	40	$R(E)$
15	5	25	30	$R(U)$
16	3	18	20	$R(m)$
17	2	35	40	$D(\ell)$
18	3	22	25	$D(E)$
19	4	38	42	$D(U)$
20	5	28	30	$D(\ell)$
21	4	37	40	$R(\ell)$
22	2	25	28	$R(E)$
23	3	28	29	$R(U)$
24	4	22	20	$R(\ell)$
25	5	27	29	$D(\ell)$
26	2	38	40	$D(E)$
27	2	33	30	$D(U)$
28	3	19	21	$D(\ell)$
29	4	29	30	$R(\ell)$
30	5	39	40	$R(E)$

ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Вариант 30

Задача 1

1.1. Волновая функция, описывающая состояние электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид:

$$\psi(x) = a\sin(kx + \alpha)$$

Условия (1) выполняются при соответствующих k и α. Из условия $\psi(0) = 0$ получаем:

$$\psi(0) = a\sin\alpha = 0$$

Следовательно, α =0. Из условия $\psi(\ell) = a\sin k\ell = 0$ следует, что:

$$k\ell = \pm\pi n$$

где n = 1, 2, 3

$$k = \pm\frac{\pi n}{\ell}$$

Подставив полученное k в (*), найдём собственные значения функции задачи:

$$\psi_n(x) = a\sin\frac{n\pi x}{\ell}$$

1.2. Для нахождения a воспользуемся условием нормировки:

$$a^2\int_0^\ell \sin^2\frac{n\pi x}{\ell}dx = 1$$

$$a^2\int_0^{\ell}\frac{1}{2}(1-\cos\frac{2\pi n}{\ell})dx = a^2\int_0^{\ell}\frac{1}{2}dx-\frac{1}{2}\int_0^{\ell}a^2\cos\frac{2\pi n}{\ell}xdx = a^2\ell\frac{1}{2}=1$$

Тогда получим: $a^2\left(\frac{1}{2}\right)\ell=1$, $a=\sqrt{\frac{2}{\ell}}$ и собственная функция имеет вид:

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{\ell}}\sin\frac{n\pi x}{\ell} \qquad \text{(n=1,2,3,…)}$$

Задача 2

2.1. Так как $x(0)=0$, определим координату точки, в которой синусоида достигает первого максимального значения:

$$\frac{n\pi x}{\ell}=\frac{\pi}{2} \qquad x=\frac{\pi\cdot\ell}{2\cdot n\cdot\pi} \qquad x=\frac{\ell}{2\cdot n}.$$

При $n=2$, $\ell=5нм$, $x=\frac{\ell}{4}=1{,}25нм$

При $n=4$, $\ell=5нм$ $x=\frac{\ell}{8}=0{,}625нм$

Амплитуда: $a=\sqrt{\frac{2}{\ell}}=\sqrt{\frac{2}{5\cdot10^{-9}}}=10^4\cdot\sqrt{4}=2\cdot10^4$

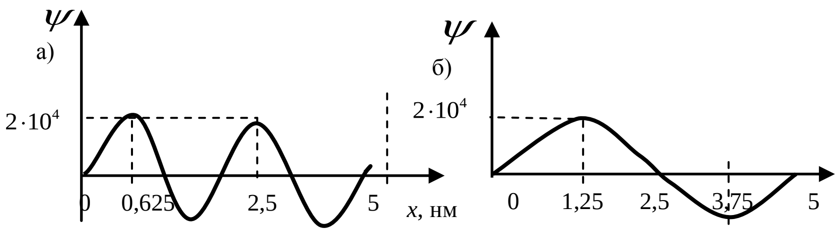

Рис. 2.1. Графики собственных функций: а) при *n* = 4 б) при *n* = 2

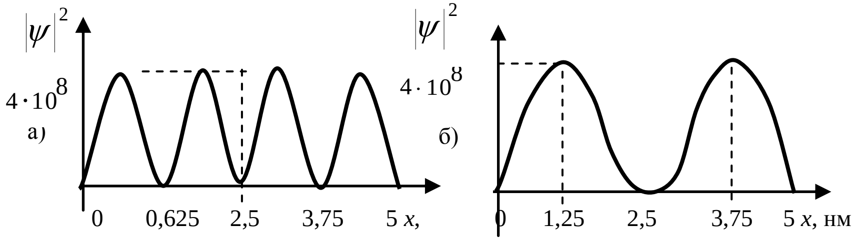

Рис. 2.2. Графики плотности вероятности: а) при n = 4 б) при n = 2

2.3. В области $0 \le x \le \ell$, так как потенциальная энергия U = 0, уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0,$$

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

Так как $k = \pm\frac{\pi n}{\ell}$, то:

$$\frac{2m}{\hbar^2}E = \pm\frac{\pi^2 n^2}{\ell^2},$$

следовательно:

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}, \ (n=1,2,3,\ldots.),$$

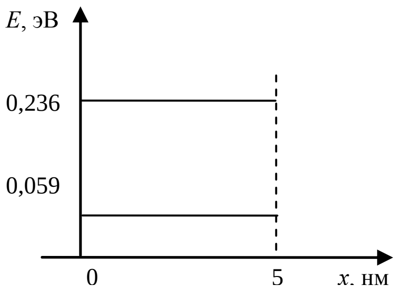

Рис. 2.3. Энергетические уровни в потенциальной яме

где ℓ - ширина квантовой ямы, а n - квантовое число, определяющее квантовые уровни частицы. Подставим численные значения:

$$E_1 = \frac{2^2\cdot 3{,}14^2\cdot(1{,}05\cdot10^{-34})^2}{2\cdot 9{,}1\cdot10^{-31}\cdot 25\cdot10^{-18}} = 0{,}096\cdot10^{-19}\,Дж = 0{,}059\,эВ,$$

$$E_2 = \frac{4^2\cdot 3{,}14^2\cdot(1{,}05\cdot10^{-34})^2}{2\cdot 9{,}1\cdot10^{-31}\cdot 25\cdot10^{-18}} = 0{,}384\cdot10^{-19}\,\text{Дж} = 0{,}236\,\text{эВ}.$$

2.4. Вероятность найти частицу в интервале $x_1<x<x_2$ есть $W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx$, где $\psi_n(x)$ - нормированная собственная волновая функция. Для прямоугольной ямы: $\psi_n(x) = \sqrt{2/\ell}\,\sin(\pi n x/\ell)$. Учитывая, что n = 2, получим $W = (2/\ell)\int_{x_1}^{x_2} \sin^2(2\pi x/\ell)dx$. По условию $x_1 = 0$ и $x_2 = 2\,\ell/3$. Проведем замену $\sin^2(2\pi x/\ell) = [1-\cos(4\pi x/\ell)]/2$ и разобьем интеграл на два:

$$W_1 = \frac{2}{\ell}\int_0^{2\ell/3} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{\ell}\right)dx = \frac{1}{\ell}\left\{\int_0^{2\ell/3} dx - \int_0^{2\ell/3} \cos\left(\frac{4\pi x}{\ell}\right)dx\right\} =$$

$$= \frac{2}{3} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\frac{4\pi}{3} - \sin 0\right) = \frac{2}{3} + \frac{1}{4\cdot\pi}(\frac{\sqrt{3}}{2} - 0) = \frac{2}{3} + \frac{\sqrt{3}}{8\cdot\pi} =$$

$$= 0{,}74$$

При n = 4 вероятность:

$$W_2 = \frac{2}{\ell}\int_0^{2\ell/3} \sin^2\left(\frac{4\pi x}{\ell}\right)dx = \frac{1}{\ell}\left\{\int_0^{2\ell/3} dx - \int_0^{2\ell/3} \cos\left(\frac{8\pi x}{\ell}\right)dx\right\} =$$

$$= \frac{2}{3} - \frac{1}{8\pi}\left(\sin\frac{8\pi}{3} - \sin 0\right) = \frac{2}{3} - \frac{1}{8\cdot\pi}(\frac{\sqrt{3}}{2} - 0) = \frac{2}{3} - 0{,}03 = 0{,}64$$

2.5. Среднее значение координаты определяется:

$$\langle x\rangle = \int_{x_1}^{x_2} \psi^* x \psi dx,$$

$$\langle x\rangle=\frac{2}{\ell}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sin^2\frac{n\pi x}{\ell}\cdot x\cdot dx=\frac{2}{\ell}\cdot\frac{1}{2}\int\limits_{x_1}^{x_2}(1-\cos\frac{2n\pi x}{\ell})\cdot x\cdot dx=$$

$$=\frac{1}{\ell}\int\limits_{x_1}^{x_2}xdx-\frac{1}{\ell}\int\limits_{x_1}^{x_2}\cos\frac{2n\pi x}{\ell}\cdot x\cdot dx=(*)$$

$$\frac{1}{\ell}\cdot\int\limits_{x_1}^{x_2}\cos\frac{2n\pi x}{\ell}\cdot x\cdot dx=\begin{bmatrix} u=x,\ du=dx\ ; & \upsilon=\int\cos\frac{2n\pi x}{\ell}dx= \\ d\upsilon=\cos\frac{2n\pi x}{\ell}dx, & =\frac{\ell}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{\ell}\end{bmatrix}=$$

$$=\frac{1}{\ell}(x\frac{\ell}{2n\pi}\sin\frac{2\pi nx}{\ell}|_{x_1}^{x_2}-\frac{\ell}{2n\pi}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sin\frac{2n\pi}{\ell}dx)=$$

$$=\frac{1}{2n\pi}(x_2\sin\frac{2\pi nx_2}{\ell}-x_1\sin\frac{2\pi nx_1}{\ell})+$$

$$+\frac{\ell}{4n^2\pi^2}(\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_2-\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_1);$$

$$(*)=\langle x\rangle=\frac{1}{2\ell}(x_2^2-x_2^2)-\frac{1}{2n\pi}(x_2\sin\frac{2\pi nx_2}{\ell}-x_1\sin\frac{2\pi nx_1}{\ell})-$$

$$-\frac{\ell}{4n^2\pi^2}(\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_2-\cos\frac{2n\pi}{\ell}x_1).$$

При $n = 2$

$$\langle x\rangle=\frac{1}{2\ell}({x_2}^2-x_1^2)-\frac{1}{4\pi}(x_2\sin\frac{4\pi x_2}{\ell}-x_1\sin\frac{4\pi x_1}{\ell})-$$

$$-\frac{\ell}{16\pi^2}(\cos\frac{4\pi}{\ell}x_2-\cos\frac{4\pi}{\ell}x_1)=1{,}185(\text{нм})$$

При $n = 4$

$$\langle x\rangle = \frac{1}{2\ell}(x_2{}^2 - x_1^2) - \frac{1}{8\pi}(x_2 \sin\frac{8\pi x_2}{\ell} - x_1 \sin\frac{8\pi x_1}{\ell}) -$$

$$-\frac{\ell}{64\pi^2}(\cos\frac{8\pi}{\ell}x_2 - \cos\frac{8\pi}{\ell}x_1) = 1{,}015(\text{нм})$$

3.1. Вероятность прохождения частицы с энергией E=39эВ сквозь потенциальный барьер высотой U=40 эВ определяется;

$$D = \exp[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\cdot\ell] =$$

$$= \exp[-\frac{2}{1{,}05\cdot 10^{-34}}\sqrt{2\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}(40-39)}\cdot 5\cdot 10^{-9}] =$$

$$= \exp[-51{,}4] = 4{,}76*10^{-23}$$

3.2. Отражения частицы от потенциального барьера:

$$R = 1 - D = 1 - 4{,}76*10^{-23} \approx 1$$

3.3. Построение графической зависимости: $R(E)$

$$R = 1 - D = 1 - \exp[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\cdot\ell] =$$

$$= \exp[-\frac{2}{1{,}05\cdot 10^{-34}}\sqrt{2\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}(40-E)}\cdot 5\cdot 10^{-9}]$$

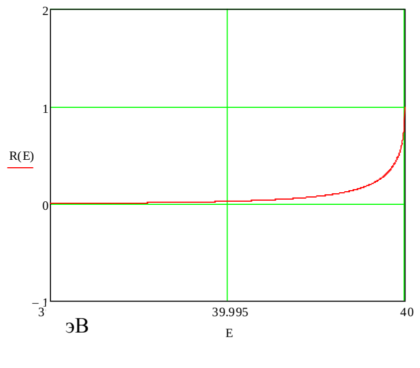

Рис. 3. Зависимость $R(E)$

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Детлаф А.А.*, Курс физики. /*Детлаф А.А,. Яворский Б.М.* М.: Высшая школа, 2009.
2. Квантовая механика, физика твёрдого тела и элементы атомной физики**/**Парфенова И.И., Егоров С.В., Мустафаев А.С. и др. Сборник задач для студентов технических специальностей, СПб.: СПГГИ (ТУ), 2010. 112 с.
3. *Савельев И.В*. Курс физики. Т.3, М.: Лань, Т. 3., 2008

ПРИЛОЖЕНИЯ

ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ

Физическая величина	**Численное значение**
Скорость света в вакууме	$c = 2{,}9979250(10)\cdot10^{8}$ м/с
Постоянная Больцмана	$k = 1{,}3807\cdot10^{-23}$ Дж/К
Элементарный заряд	$e = 1{,}602\cdot10^{-19}$ Кл
Масса электрона	$m_e = 0{,}911\cdot10^{-30}$ кг = 0,511 МэВ
Удельный заряд электрона	$e/m_e = 1{,}76\cdot10^{11}$ Кл/кг
Масса протона	$m_p = 1{,}672\cdot10^{-27}$ кг
Удельный заряд протона	$e/m_p = 0{,}959\cdot10^{8}$ Кл/кг
Постоянная Планка	$h = 6{,}626\cdot10^{-34}$ Дж·с
	$\hbar = h/2\pi = 1{,}0546\cdot10^{-34}$Дж·с = = $0{,}659\cdot10^{-15}$ эВ·с
Атомная единица массы	1 а.е.м. = $1{,}660\cdot10^{-27}$ кг
Электрическая постоянная	$\varepsilon_0 = 8{,}85\cdot10^{-12}$ Ф·м$^{-1}$, $1/(4\pi\varepsilon_0) = 9\cdot10^{9}$ м/Ф

СОДЕРЖАНИЕ

.