

Задания к курсовой работе “ Стационарные квантовые состояния частицы”.
Дисциплина “Квантовая механика и статистическая физика”
2020-2021 уч.г.

Теоретическая часть (Для всех вариантов)

1. Определение стационарного квантового состояния.
2. Общий вид волновой функции стационарного состояния.
3. Вывод стационарного уравнения Шредингера для одной частицы.
4. Граничные условия для волновых функций локализованных стационарных состояний.
5. Свойства волновых функций стационарных состояний.
6. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора.

Расчетная часть

I. Частица в потенциальной яме.

I-1. Частица с массой m находится в одномерной потенциальной яме:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ -U_0 & \text{при } 0 < x < d \\ 0 & \text{при } x > d \end{cases}$$

где $U_0 > 0$ и d — заданные параметры.

- Вывести уравнение для уровней энергии частицы.
- Решив графически это уравнение (с помощью компьютера), найти приближенные значения энергии основного и первого возбужденного состояний (в эВ), если частица — электрон.
- Сравнить результат для энергии основного состояния с оценкой, получаемой из соотношения неопределенностей.
- Вычислить минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если первоначально электрон находится в основном состоянии.
- Обсудить полученные результаты.

Значения параметров:

- а) $U_0 = 0,1$ эВ, $d = 6$ нм;
- б) $U_0 = 0,2$ эВ, $d = 5$ нм;
- в) $U_0 = 0,4$ эВ, $d = 4$ нм;
- г) $U_0 = 0,5$ эВ, $d = 3$ нм;
- д) $U_0 = 0,5$ эВ, $d = 4$ нм;
- е) $U_0 = 0,3$ эВ, $d = 5$ нм

I-2. Частица с массой m находится в одномерной потенциальной яме:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{при } x < 0 \\ 0 & \text{при } 0 < x < d \\ U_0 & \text{при } x > d \end{cases}$$

где $U_0 > 0$ и d — заданные параметры.

- Вывести уравнение для уровней энергии частицы.
- Решив графически это уравнение (с помощью компьютера), найти приближенные значения энергии основного и первого возбужденного состояний (в эВ), если частица — электрон.
- Сравнить результат для энергии основного состояния с оценкой, получаемой из соотношения неопределенностей.
- Вычислить минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если первоначально электрон находится в основном состоянии.
- Обсудить полученные результаты.

Значения параметров:

- а) $U_0 = 0,1$ эВ, $d = 6$ нм;
- б) $U_0 = 0,2$ эВ, $d = 5$ нм;
- в) $U_0 = 0,4$ эВ, $d = 4$ нм;
- г) $U_0 = 0,5$ эВ, $d = 3$ нм;
- д) $U_0 = 0,5$ эВ, $d = 4$ нм;
- е) $U_0 = 0,3$ эВ, $d = 4$ нм.

I-3. Частица с массой m находится в одномерной потенциальной яме:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < 0 \\ 0 & \text{при } 0 < x < d \\ U_2 & \text{при } x > d \end{cases}$$

где $U_1 > 0$, $U_2 > 0$, и d — заданные параметры ($U_1 > U_2$).

- Вывести уравнение для уровней энергии частицы.
- Решив графически это уравнение (с помощью компьютера), найти приближенное значение энергии основного состояния (в эВ), если частица — электрон.
- Сравнить результат для энергии основного состояния с оценкой, получаемой из соотношения неопределенностей.
- Вычислить минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если первоначально электрон находится в основном состоянии.
- Обсудить полученные результаты.

Значения параметров:

- а) $U_1 = 0,2$ эВ, $U_2 = 0,1$ эВ, $d = 6$ нм;
- б) $U_1 = 0,3$ эВ, $U_2 = 0,2$ эВ, $d = 5$ нм;
- в) $U_1 = 0,5$ эВ, $U_2 = 0,4$ эВ, $d = 4$ нм;
- г) $U_1 = 0,7$ эВ, $U_2 = 0,5$ эВ, $d = 3$ нм;
- д) $U_1 = 0,55$ эВ, $U_2 = 0,3$ эВ, $d = 4$ нм.
- е) $U_1 = 0,4$ эВ, $U_2 = 0,35$ эВ, $d = 5$ нм.

I-4. Частица с массой m находится в двумерной потенциальной яме:

$$U(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < d_1, 0 < y < d_2 \\ U_0 & \text{вне ямы} \end{cases}$$

где $U_0 > 0$, d_1 и d_2 — заданные параметры.

- Вывести уравнение для уровней энергии частицы.
- Решив графически это уравнение (с помощью компьютера), найти приближенное значение энергии основного состояния (в эВ), если частица — электрон.
- Сравнить результат для энергии основного состояния с оценкой, получаемой из соотношения неопределенностей.
- Вычислить минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если первоначально электрон находится в основном состоянии.
- Обсудить полученные результаты.

Значения параметров:

- а) $U_0 = 0,1$ эВ, $d_1 = 6$ нм, $d_2 = 7$ нм;
- б) $U_0 = 0,2$ эВ, $d_1 = 5$ нм, $d_2 = 6$ нм;
- в) $U_0 = 0,4$ эВ, $d_1 = 4$ нм, $d_2 = 5$ нм;
- г) $U_0 = 0,5$ эВ, $d_1 = 3$ нм, $d_2 = 4$ нм;
- д) $U_0 = 0,35$ эВ, $d_1 = 4$ нм, $d_2 = 4$ нм;
- е) $U_0 = 0,3$ эВ, $d_1 = 4$ нм, $d_2 = 5$ нм

I-5. Частица с массой m движется в трехмерной сферически симметричной потенциальной яме:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ U_0, & r > a, \end{cases}$$

где $U_0 > 0$ — глубина ямы, a — радиус ямы.

- Вывести уравнение для уровней энергии частицы. **Ограничиться случаем стационарных состояний, в которых волновая функция зависит только от радиальной переменной r .**
- Решив графически это уравнение (с помощью компьютера), найти приближенные значения энергии основного состояния и первого возбужденного состояния (в эВ), если частица — электрон.
- Сравнить результат для энергии основного состояния с оценкой, получаемой из соотношения неопределенностей.
- Вычислить минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если первоначально электрон находится в основном состоянии.
- Обсудить полученные результаты.

Значения параметров:

- а) $U_0 = 0,1$ эВ, $d = 6$ нм;
- б) $U_0 = 0,2$ эВ, $d = 5$ нм;
- в) $U_0 = 0,4$ эВ, $d = 4$ нм;
- г) $U_0 = 0,5$ эВ, $d = 3$ нм;
- д) $U_0 = 0,3$ эВ, $d = 3$ нм;
- е) $U_0 = 0,25$ эВ, $d = 4,5$ нм

II. Гармонический осциллятор.

- Вывести формулу для плотности вероятности $\varrho_{\text{кл}}(x)$ обнаружить классический осциллятор с заданной энергией E в точке с координатой x . Масса осциллятора m , частота колебаний ω .

Указание: Считать, что вероятность $dw(x)$ обнаружить осциллятор в интервале $(x, x + dx)$ равна отношению $2 dt/T$, где dt — время прохождения осциллятором этого интервала, T — период колебаний осциллятора.

- Построить графики волновой функции гармонического осциллятора и плотности вероятности $\varrho(x)$, если осциллятор находится: а) в стационарном состоянии с $n = n_1$; б) в стационарном состоянии с $n = n_2$.

Сравнить графики для $\varrho(x)$ с предсказанием классической теории гармонического осциллятора (с той же энергией). Какие выводы можно сделать из этого сравнения?

Указание: **Графики строятся с помощью компьютера.** При построении графиков использовать в качестве переменной безразмерную координату $x^* = x/x_0$, где $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$.

Варианты значений n_1 и n_2 :

- | | |
|-------------------------------|--------------------------------|
| 1) $n_1 = 1, \quad n_2 = 7;$ | 2) $n_1 = 2, \quad n_2 = 8;$ |
| 3) $n_1 = 1, \quad n_2 = 9;$ | 4) $n_1 = 2, \quad n_2 = 6;$ |
| 5) $n_1 = 1, \quad n_2 = 5;$ | 6) $n_1 = 1, \quad n_2 = 8;$ |
| 7) $n_1 = 2, \quad n_2 = 7;$ | 8) $n_1 = 1, \quad n_2 = 6;$ |
| 9) $n_1 = 2, \quad n_2 = 5;$ | 10) $n_1 = 2, \quad n_2 = 9;$ |
| 11) $n_1 = 1, \quad n_2 = 5;$ | 12) $n_1 = 2, \quad n_2 = 10;$ |
| 13) $n_1 = 3, \quad n_2 = 7;$ | 14) $n_1 = 3, \quad n_2 = 8;$ |
| 15) $n_1 = 3, \quad n_2 = 5;$ | 16) $n_1 = 4, \quad n_2 = 7;$ |
| 17) $n_1 = 3, \quad n_2 = 6;$ | 18) $n_1 = 4, \quad n_2 = 5;$ |
| 19) $n_1 = 3, \quad n_2 = 9;$ | 20) $n_1 = 4, \quad n_2 = 6.$ |

Пример оформления графика

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right) \quad (2)$$

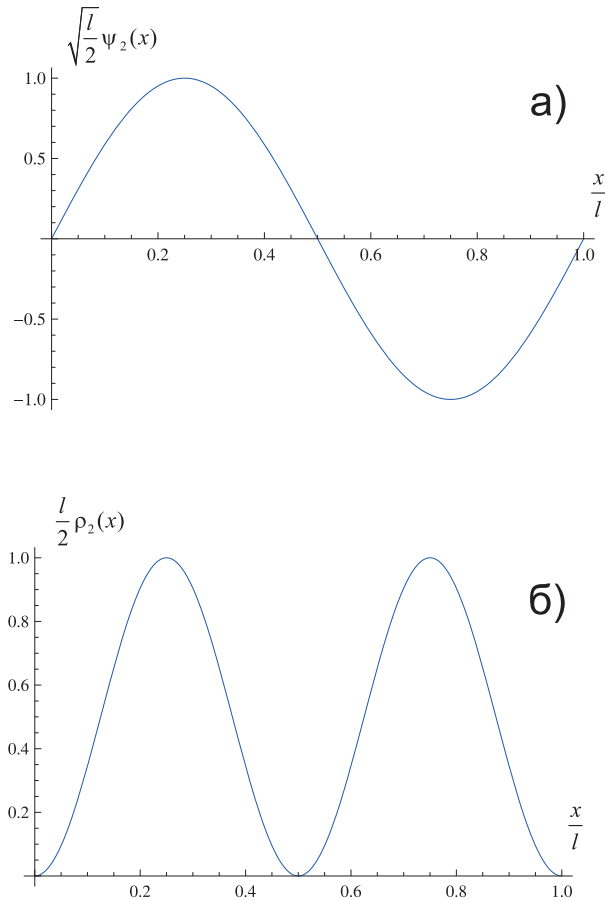


Рис. 3. Волновая функция $\psi_2(x)$ (а) и плотность вероятности $\rho_2(x) = \psi_2^2(x)$ (б) для первого возбужденного состояния частицы в “бесконечно глубокой” одномерной потенциальной яме ширины l .