



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«МИРЭА - Российский технологический университет» РТУ МИРЭА

Институт перспективных технологий и индустриального программирования
Кафедра нанoeлектроники

КУРСОВАЯ РАБОТА

по дисциплине Квантовая механика и статистическая физика

(наименование дисциплины)

Тема курсовой работы Стационарные квантовые состояния частицы

Студент Зухуршоев Шахромджон Джиеншоевич

(ФИО)

(подпись)

Группа ЭНБО-01-20

Работа представлена к защите « ____ » _____ 20__ г.

Допущен к защите « ____ » _____ 20__ г.

Москва, 20__ г



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«МИРЭА - Российский технологический университет»
РТУ МИРЭА

Институт перспективных технологий и индустриального программирования
Кафедра нанoeлектроники

Утверждаю

Подпись

ФИО

«___» _____ 20__ г.

Задание
на выполнение курсовой работы по дисциплине
Квантовая механика и статистическая физика

Студент: Зухуршоев Шахромджон Джиеншоевич

Группа: ЭНБО-01-20

Тема Стационарные квантовые состояния частицы

Исходные данные: Вариант 12: I-2e ($U_0 = 0,3$ эВ, $d = 4$ нм), II-6 ($n_1 = 1, n_2 = 8$).

Перечень вопросов, подлежащих разработке:

Стационарные квантовые состояния частицы. Волновые функции стационарных состояний. Уравнение Шредингера для одной частицы.

Срок представления к защите курсовой работы: до «___» _____ 20__ г

Задание на курсовую работу выдал «___» _____ 20__ г.
_____/_____

Задание на курсовую работу получил «___» _____ 20__ г
/_____

Протокол
защиты курсовой работы
Студента(ки) Зухуршоев Шахромджон Джиеншоевич
ФИО
по дисциплине Квантовая механика и статистическая физика
тема Стационарные квантовые состояния частицы

1. Общая характеристика курсовой работы

Критерий	Да	Нет	Не полностью
1. Соответствие теме работы			
2. Соответствие заданию			
3. Полнота ответа на теоретические вопросы			
4. Полнота решения практической задачи			
5. Полнота выводов			
6. Правильность оформления курсовой работы			

2. Характеристика ответов на вопросы на защите

Критерий	Да	Нет	Не полностью
1. Полнота ответа			
2. Правильность ответа			
3. Глубина знаний			
4. Четкость формулировок			
5. Степень понимания проблем			

Итоговая оценка: удовлетворительно, хорошо, отлично

Подписи членов комиссии:

Оглавление

Введение	5
1. Теоретическая часть	6
1.1. Определение стационарного квантового состояния	6
1.2. Общий вид волновой функции стационарного состояния	6
1.3. Вывод стационарного уравнения Шредингера для одной частицы	6
1.4. Граничные условия для волновых функций локализованных стационарных состояний	8
1.5. Свойства волновых функций стационарных состояний.....	8
1.6. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора	9
2. Частица в одномерной потенциальной яме	13
2.1. Вывод уравнения для уровней энергии частицы.....	13
2.2. Графическое решение уравнения.....	15
2.3. Сравнение с соотношением неопределенностей	17
2.4. Нахождение минимальной энергии	17
3. Гармонический осциллятор	18
3.1. Вывод формулы для плотности вероятности $\varrho(x)$	18
3.2. Построение графиков	19
Заключение	24
Список использованных источников.....	25

Введение

Начало последней четверти XIX века было связано с большим количеством открытий в области физики, многие из которых касались квантовой теории, которая сыграла важнейшую роль в формировании и утверждении во второй половине XX века «постклассической» науки, пришедшей на смену «классической» науке XIX века.

У физиков сложилось представление о том, что все принципиальные закономерности науки уже установлены, а несоответствия экспериментальных данных теоретическим представлениям казались устранимыми в рамках имеющихся теорий. Однако развитие физики разрушило это представление. Квантовая механика была создана усилиями множества крупнейших физиков и мыслителей 20-го века, таких как А. Эйнштейн, Н. Бор, В. Гейзенберг и др.

1. Теоретическая часть

1.1. Определение стационарного квантового состояния

Стационарным состоянием (от лат. stationarius — стоящий на месте, неподвижный) называется состояние квантовой системы, при котором её энергия и другие динамические величины, характеризующие квантовое состояние, не изменяются [1].

Нильс Бор в 1916 г. сформулировал свои постулаты, согласно которым атом может переходить из одного стационарного состояния в другое лишь с помощью поглощения или выделения кванта с энергией, равной разности энергий атома в начальном и конечном стационарных состояниях. Квантовая теория стационарных состояний была разработана Эрвином Шрёдингером в 1925 году.

1.2. Общий вид волновой функции стационарного состояния

Стационарные состояния системы [1] описываются с помощью волновых функций Ψ_n , являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т.е. удовлетворяющими уравнению (1):

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n = i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t}, \quad (1)$$

где E_n — собственные значения энергии.

Которое может быть непосредственно проинтегрировано по времени, что приведёт к (2):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (2)$$

где $\psi(\vec{r})$ где подчиняется стационарному уравнению Шрёдингера.

1.3. Вывод стационарного уравнения Шредингера для одной частицы

По теореме Эренфеста, полной энергии E соответствует оператор Гамильтона \hat{H} . В стационарных состояниях сохраняется энергия системы E [2], а значит (3):

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial E}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Отсутствие явной зависимости гамильтониана от времени позволяет выполнить разделение переменных. Волновую функцию выражаем в виде произведения (4):

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(t)\psi(r) \quad (4)$$

Множитель $f(t)$ отражает волновую природу частиц в квантовой теории. Подставим (4) в уравнение Шредингера, из чего следует (5):

$$i\hbar * \psi(r) * \frac{df(t)}{dt} = f(t) * \hat{H}\psi(r) \quad (5)$$

и разделим обе части равенства на произведение $f(t) * \psi(r)$, получая (6):

$$i\hbar * \frac{df(t)}{dt} \frac{1}{f} = \frac{\hat{H}\psi(r)}{\psi(r)} = E \quad (6)$$

Левая часть зависит лишь от времени, а правая — только от пространственных координат. Следовательно, они обе равны одной и той же константе.

Легко убедиться, что константа имеет размерность энергии. Таким образом, имеем два уравнения (7,8):

$$\frac{df}{dt} = \frac{i}{\hbar} E * f \quad (7)$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (8)$$

Причём второе уравнение показывает, что константа разделения E действительно равна энергии системы.

Зависимость волновой функции от времени (9) получаем из (8):

$$f(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \quad (9)$$

Итак, временной множитель стационарного состояния является осциллирующей функцией. Энергии E соответствует частота $\omega = E/\hbar$. Следовательно, формула (9) в той же мере описывает состояние с энергией E , как колебания на частоте ω .

Пространственная часть волновой функции удовлетворяет уравнению (8), которое, используя оператор Гамильтона, можно переписать как (10):

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]\psi = 0 \quad (10)$$

Таким образом, удалось получить **стационарное уравнение Шредингера [2]**. Полная волновая функция имеет вид (11):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (11)$$

1.4. Граничные условия для волновых функций локализованных стационарных состояний

Граничные условия к вытекают из стандартных условий [требование конечности, однозначности и непрерывности волновой функции $\Psi(x)$], а также определяются характером движения. В частности, в случае движения в ограниченной области пространства граничные условия необходимо выбирать нулевыми.

Граничные условия [3] — следствие регулярности волновой функции, что обеспечивает ее непрерывность. Эти условия формулируются на границах областей, где потенциальная функция терпит разрывы первого или второго рода.

Сюда же относятся условия на волновую функцию в бесконечно удаленных точках пространства, которые обеспечивают выполнение условия нормировки (12):

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi|^2 dV = \int \Psi^* \Psi dV = 1 \quad (12)$$

1.5. Свойства волновых функций стационарных состояний

На волновые функции, являющиеся решениями уравнения Шредингера, накладываются определенные естественные ограничения, по причине чего возникает квантование энергии [4]. Ограничения заключаются в том, что волновая функция $\psi(\vec{r})$ и ее первые производные

должны быть конечны, однозначны и непрерывны даже в точках разрыва потенциальной функции $U(r)$ (требования стандартных условий).

При обходе по любому замкнутому контуру (в том числе при обходе особых точек уравнения) волновая функция $\psi(\vec{r})$ должна возвращаться к своему прежнему значению [5]. В противном случае для одной и той же точки \vec{r} будут иметься две или больше вероятностей, что лишено всякого физического смысла (требование однозначности волновой функции).

Требование конечности волновой функции обусловлено тем, что вероятность нахождения микрочастицы в окрестности любой точки пространства должна быть конечной.

Требование непрерывности [6] — это естественное требование, предъявляемое к любой волновой функции (волна должна быть непрерывна в окрестности любой точки пространства).

Кроме того, вероятность обнаружения микрочастицы во всей области движения равна единице (вероятность достоверного события). Собственные функции $\psi(\vec{r})$ должны удовлетворять условию нормировки (12).

1.6. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора

Гармоническим осциллятором [6] называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы $F=kx$.

Изменение потенциальной энергии микрочастицы по оси x (одномерный случай) описывается формулой (13):

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (13)$$

где $\omega = \sqrt{k/m}$, а k — коэффициент жесткости. Свободные колебания гармонического осциллятора осуществляются по закону

$$x(t) = A \sin(\omega t + \alpha), \quad (14)$$

где A – амплитуда, α – начальная фаза, ω – частота колебаний. Проанализировав вид потенциальной энергии, можно понять, что частица находится в потенциальной яме с минимумом в точке $x = 0$.

Гармонический осциллятор в квантовой механике описывается уравнением Шредингера (15):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0 \quad (15)$$

У него нет естественных граничных условий. Дискретные уровни энергии получаются как следствие ограниченности волновой функции.

Преобразуем уравнение (15), вместо координаты x введём безразмерный аргумент (16):

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (16)$$

И вместо E — безразмерную энергию осциллятора (17):

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (17)$$

С принятыми обозначениями уравнение Шредингера принимает вид (18):

$$\psi'' + (\varepsilon - y^2)\psi = 0 \quad (18)$$

Линейный осциллятор имеет эквидистантную систему уровней: разность энергий двух соседних уровней постоянна и равна $\hbar\omega$. Именно такой квант энергии излучается или поглощается при переходе между соседними уровнями.

Ниже приведен график потенциальной энергии частицы для трёх первых значений n (рис. 1):

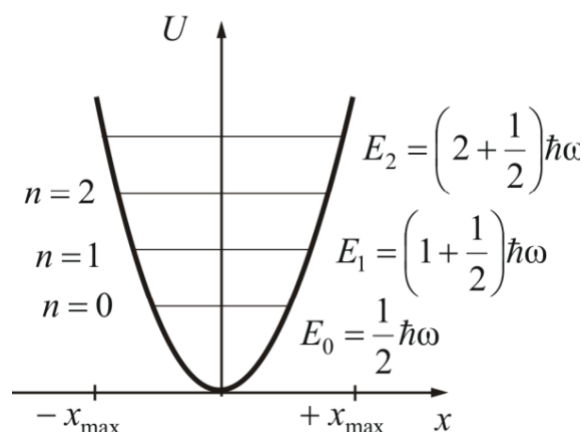


Рисунок 1. График потенциальной энергии частицы.

Парабола на графике изображает потенциальную функцию, а горизонтальные прямые — значения энергетических уровней.

Значение полной энергии осциллятора (19):

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

Выражение (19) подтверждает теорию Планка, что энергия гармонического осциллятора может изменяться лишь на величину, кратную кванту энергии $\hbar\omega$. Минимальная энергия $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ называется нулевой энергией, т.е. при $T = 0$ К колебания атомов в молекуле или кристаллической решетке не прекращаются. Это означает что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.

Энергия гармонического осциллятора изменяется только порциями, т.е. квантуется (20):

$$E_n = n\hbar\omega \quad (20)$$

Кроме того, например, при $n = 2$ в середине потенциальной ямы частицы быть не может. Квантуется не только энергия, но и координата частицы.

Волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора или собственные функции гамильтониана, имеют следующий вид (21):

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right), \quad (21)$$

где A_n – постоянная, удовлетворяющая условию нормировки (22):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x) dx = 1. \quad (22)$$

Следует отметить, что скалярное произведение собственных функции (21), соответствующих различным уровням энергии равняется нулю, они ортогональны друг другу. $\{\psi_n(x)\}$ – ортонормированная система функций.

Исходя из свойств полиномов Эрмита и выражения для волновых функций стационарных состояний гармонического осциллятора (21), можно найти A_n (23):

$$A_n = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} x_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (23)$$

2. Частица в одномерной потенциальной яме

Вариант №12

Таблица 1. Исходные данные, взятые из Методического указания по КР.

I-2е	$U_0 = 0,3 \text{ эВ}, d = 4 \text{ нм}$
------	--

2.1. Вывод уравнения для уровней энергии частицы

Условия задачи задают потенциальную прямоугольную яму конечной глубины. Тогда потенциальная энергия частицы можно записать в виде (24):

$$U(x) = \begin{cases} U_0 = 0,3 \text{ эВ}, & x < 0 & \text{область I} \\ 0, & 0 < x < d, & \text{область II} \\ U_0 = 0,3 \text{ эВ}, & x > d, & \text{область III} \end{cases} \quad (24)$$

Уравнение Шредингера в областях I и III (вне потенциальной ямы) записывается в виде (25):

$$\frac{d^2 \psi_{1,3}}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi_{1,3} = 0 \quad (25)$$

Вводя волновое число $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)}$, получаем (26):

$$\frac{d^2 \psi_{1,3}}{dx^2} - k_1^2 \psi_{1,3} = 0 \quad (26)$$

Решения этого уравнения имеют вид (27) и (28):

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x} \quad (27)$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x} \quad (28)$$

Для того, чтобы волновая функция была ограничена, необходимо выполнение того, чтобы $A_3 = 0, B_1 = 0$.

Таким образом, волновые функции частицы для данной задачи имеют вид (29) и (30):

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} \quad (29)$$

$$\psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x} \quad (30)$$

Уравнение Шредингера в области II (внутри потенциальной ямы) записывается в виде (31):

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \psi_2 = 0 \quad (31)$$

Вводя волновое число $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E}$, получаем (32):

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + k_2^2 \psi_2 = 0 \quad (32)$$

Решение этого уравнения имеет вид (33) или (34):

$$\psi_2(x) = C * \sin(k_2 x + \alpha), \text{ при четных } n \quad (33)$$

$$\psi_2(x) = C * \cos(k_2 x + \alpha), \text{ при нечетных } n \quad (34)$$

Сшивая эти решения на границе ямы, получаем при $x = x_0$ следующие соотношения (35) и (36):

$$\psi_1(x_0) = \psi_2(x_0) = \psi_3(x_0) \quad (35)$$

$$\frac{d\psi_1(x_0)}{dx} = \frac{d\psi_2(x_0)}{dx} = \frac{d\psi_3(x_0)}{dx} \quad (36)$$

Далее будем рассматривать только правую половину ямы ($x \geq 0$).

Для нечетных энергетических уровней, подставляя (30) и (34) в (36), получаем соотношения (37) и (38):

$$C * \cos(k_2 x_0 + \alpha) = B_3 e^{-k_1 x_0} \quad (37)$$

$$k_2 * C * \sin(k_2 x_0 + \alpha) = k_1 * B_3 e^{-k_1 x_0} \quad (38)$$

Разделив эти соотношения, приходим к выражению (39):

$$k_2 \operatorname{tg}(k_2 x_0 + \alpha) = k_1 \quad (39)$$

Учитывая, что $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)}$ и $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$, запишем следующее выражение (40):

$$k_2 \operatorname{tg} \left(\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E x_0} + \alpha \right) = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (40)$$

Упростив которое, получаем следующее уравнение (41):

$$\operatorname{tg} \left(\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E x_0} + \alpha \right) = \sqrt{(U_0 - E) * E} \quad (41)$$

Для четных значений n (37) запишем граничные условия (36) при $x = x_0$ (42) и (43):

$$C * \sin(k_2 x_0 + \alpha) = B_3 e^{-k_1 x_0} \quad (42)$$

$$k_2 * C * \sin(k_2 x_0 + \alpha) = k_1 * B_3 e^{-k_1 x_0} \quad (43)$$

Разделив эти соотношения, получим уравнение (44), которое позволит определить собственные значения энергии и Y -функции на четных энергетических уровнях:

$$\operatorname{ctg} \left(\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E x_0} + \alpha \right) = -\sqrt{(U_0 - E) * E} \quad (44)$$

Исключая в уравнениях (41) и (44) α с помощью следующего тригонометрического равенства (45):

$$\operatorname{arctg}(\alpha) = \arcsin \left(\frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} \right), \quad (45)$$

приходим к следующему виду уравнения (46) для k :

$$k x_0 = n\pi - 2 * \arcsin \left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2m_0 U_0}} \right), \quad n = 1, 2 \quad (46)$$

2.2. Графическое решение уравнения

Уравнение (46) является трансцендентным и может быть решено графически. Точки пересечения графиков $y = x_0 k$ и $y = n\pi - 2 *$

* $\arcsin\left(\frac{k}{\sqrt{k_0}}\right)$, где $k_0 = \sqrt{\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2}}$, определяют возможные значения k_n волнового числа, а затем уровни энергии (47):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_0} \quad (47)$$

Подставив исходные данные, вычислим коэффициент k_0 (48):

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 0,511 \cdot 10^6 \cdot 0,3}{(6,6 \cdot 10^{-16})^2}} = 8,4 \cdot 10^{17}, \quad (48)$$

таким образом, получаем следующее уравнение (49):

$$k \cdot 4 \cdot 10^{-9} = n\pi - 2 \cdot \arcsin\left(\frac{k}{\sqrt{8,4 \cdot 10^{17}}}\right), \quad n = 1, 2 \quad (49)$$

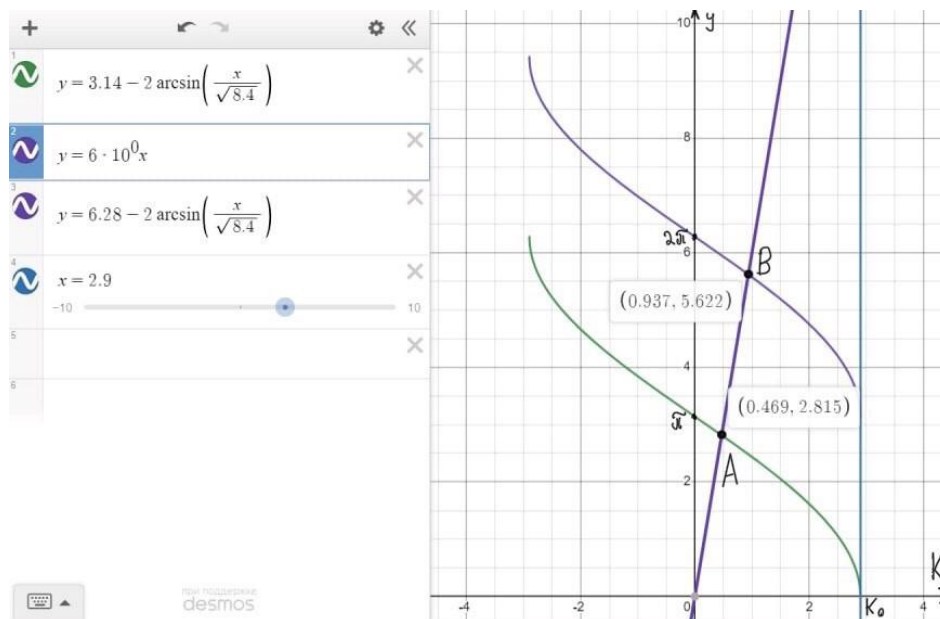


Рисунок 2. График решения уравнения (49).

С помощью рисунка 2 найдем приближенное значение энергии основного состояния ($n=1$) частицы электрон в точке А (50):

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_0 d^2} = \frac{(1,1 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 0,469^2 \cdot 10^{18}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \cdot 6,24 \cdot 10^{18} \approx 0,009 \text{ эВ} \quad (50)$$

Аналогичным образом найдем приближенное значение энергии первого возбуждённого состояния ($n=2$) частицы электрон в точке В (51):

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_0 d^2} = \frac{(1,1 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 0,937^2 \cdot 10^{18}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \cdot 6,24 \cdot 10^{18} \approx 0,036 \text{ эВ} \quad (51)$$

2.3. Сравнение с соотношением неопределенностей

Сравним результат для энергии основного состояний с оценкой, получаемой из соотношения неопределённости. Найдем минимально возможную энергию электрона в яме как (52):

$$E = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m_e} \quad (52)$$

Используя соотношение неопределенностей Гейзенберга и учитывая порядок величины получим (53):

$$\Delta x \Delta p_x \approx \hbar \quad (53)$$

Зная область локализации запишем (54):

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{d} \quad (54)$$

Так как электрон локализован, то $\langle p_x \rangle = 0$ и $\langle p_x^2 \rangle = (\Delta p_x)^2 \approx \frac{\hbar^2}{d^2}$, из чего следует, что минимально возможную энергию электрона в яме можно представить как (55):

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2m_e d^2} \quad (55)$$

Произведя расчеты получим значение для энергии электрона в основном состоянии (56):

$$E_{\text{осн}} = \frac{(1,1 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (4 \cdot 10^{-9})^2} \cdot 6,24 \cdot 10^{18} = 0,003 \text{ эВ} \quad (56)$$

2.4. Нахождение минимальной энергии

Определим минимальную энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул яму, если он изначально находится в основном состоянии (57):

$$E_{\text{min}} = U - E_1 = 0,3 - 0,009 = 0,291 \text{ эВ} \quad (57)$$

3. Гармонический осциллятор

Таблица 2. Исходные данные, взятые из Методического указания по КР.

П-6	$n_1 = 1 \text{ нм}, n_2 = 8 \text{ нм}.$
-----	---

3.1. Вывод формулы для плотности вероятности $\varrho_{\text{кл}}(x)$

Учитывая указания к задаче, будем считать, что вероятность $d\omega(x)$ обнаружить осциллятор в интервале $(x, x + dx)$ равна следующему отношению (58):

$$d\omega(x) = \frac{2dt}{T}, \quad (58)$$

где ω – циклическая частота.

Запишем следующее выражение (59):

$$vdt = dx \quad (59)$$

Выражая период через частоту колебаний:

$$T = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (60)$$

Раскроем T и подставим (59) в (58), получим следующее выражение (60):

$$d\omega(x) = \varrho_n(x) = \frac{\omega dx}{\pi v} \quad (61)$$

В свою очередь, координата x меняется гармонически:

$$x = A \sin(\omega t + \alpha), \quad (62)$$

где A – амплитуда колебаний, α – фаза колебаний.

Таким образом, запишем формулу для плотности вероятности (63), используя формулы (59), (60), (61) и (62):

$$\varrho_n(x) = v = \frac{dx}{dt} = A\omega \cos(\omega t + \alpha) = \frac{\omega}{\pi \sqrt{\frac{2E_n - x^2 \omega^2 m}{m}}}, \quad (63)$$

$$\text{где } A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

Энергию E_n можно выразить из уравнения Шредингера (64):

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{mx^2\omega^2}{2}\right)\Psi = 0. \quad (64)$$

Учитывая, что $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ и $x^* = x/x_0$, получим следующее (65), (66):

$$\sigma = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \quad (65)$$

$$\frac{d^2}{d(x^*)^2}\Psi + (\sigma - (x^*)^2)\Psi = 0, \quad (66)$$

где $\sigma = 2E_n/\hbar\omega$.

Решения уравнения (65) показывают, что волновые функции непрерывны и конечны лишь при значениях (67):

$$\sigma = 2n + 1, n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (67)$$

Подставим (67) в (65):

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (65)$$

Запишем итоговую формулу (68), используя (65):

$$\varrho_n(x) = \frac{\omega}{\pi\sqrt{\frac{\hbar\omega(2n+1) - x^2\omega^2 m}{m}}} \quad (68)$$

3.2. Построение графиков

Для построения графика нам требуется плотность вероятности, зависящая от безразмерной величины x^* (69):

$$\varrho_{\text{кл}}(x^*) = \frac{1}{\pi\sqrt{2n+1 + (x^*)^2}}. \quad (69)$$

Для $n = n_1$ (70):

$$\varrho_{\text{кл}(1)}(x^*) = \frac{1}{\pi\sqrt{3 - (x^*)^2}} \quad (70)$$

Для $n = n_2$ (71):

$$\varrho_{\text{кл}(8)}(x^*) = \frac{1}{\pi\sqrt{17 - (x^*)^2}} \quad (71)$$

Из теории дифференциальных счислений мы знаем, что решения уравнения (66) имеют вид (21), преобразуем его учитывая x^* (72):

$$\Psi_n(x^*) = A_n e^{-\frac{(x^*)^2}{2}} H_n(x^*), \quad (72)$$

тогда плотность вероятности выглядит следующим образом (73):

$$\varrho(x^*) = A_n^2 e^{-(x^*)^2} H_n^2(x^*), \quad (73)$$

где H_n – полиномы Эрмита. Их значения для n_1 и n_2 (74), (75):

$$H_1 = 2x^* \quad (74)$$

$$H_8 = 256(x^*)^8 - 3584(x^*)^6 + 13440(x^*)^4 - 13440(x^*)^2 + 1680. \quad (75)$$

Постоянная A_n для (72) имеет вид (76):

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}}, \quad (76)$$

для n_1 и n_2 соответственно (77):

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}}; \quad A_8 = \frac{1}{\sqrt{10321920\sqrt{\pi}}} \quad (77)$$

Представим окончательный вид $\varrho_1(x^*)$ и $\varrho_8(x^*)$ используя (74), (75) и (77), получим (78) и (79):

$$\varrho_1(x^*) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-(x^*)^2} (2x^*)^2, \quad (79)$$

$$\varrho_8(x^*) = \frac{1}{10321920\sqrt{\pi}} e^{-(x^*)^2} (256(x^*)^8 - 3584(x^*)^6 + 13440(x^*)^4 - 13440(x^*)^2 + 1680)^2 \quad (80)$$

Представим окончательный вид $\Psi_1(x^*)$ и $\Psi_8(x^*)$ используя (74), (75) и (77), получим (81) и (82):

$$\Psi_1(x^*) = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x^*)^2}{2}} (2x^*) \quad (81)$$

$$\Psi_8(x^*) = \frac{1}{\sqrt{10321920\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x^*)^2}{2}} (256(x^*)^8 - 3584(x^*)^6 + 13440(x^*)^4 - 13440(x^*)^2 + 1680) \quad (82)$$

Изобразим найденные плотности вероятности для n_1 (рис. 3) и n_2 (рис. 4):

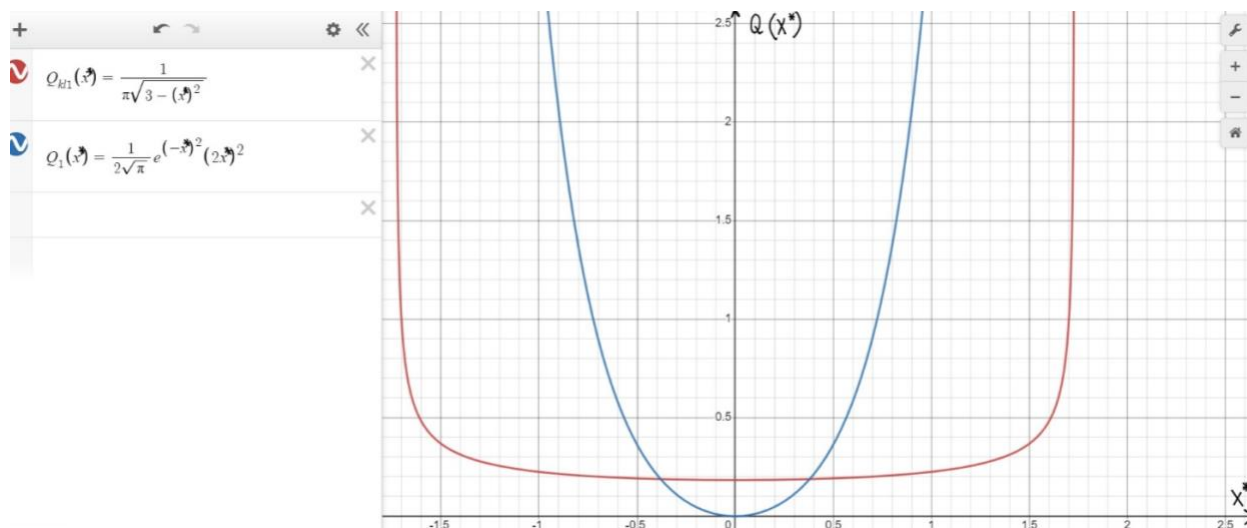


Рисунок 3. График плотности вероятности $Q_1(x^*)$ и $Q_{kl(1)}(x^*)$.

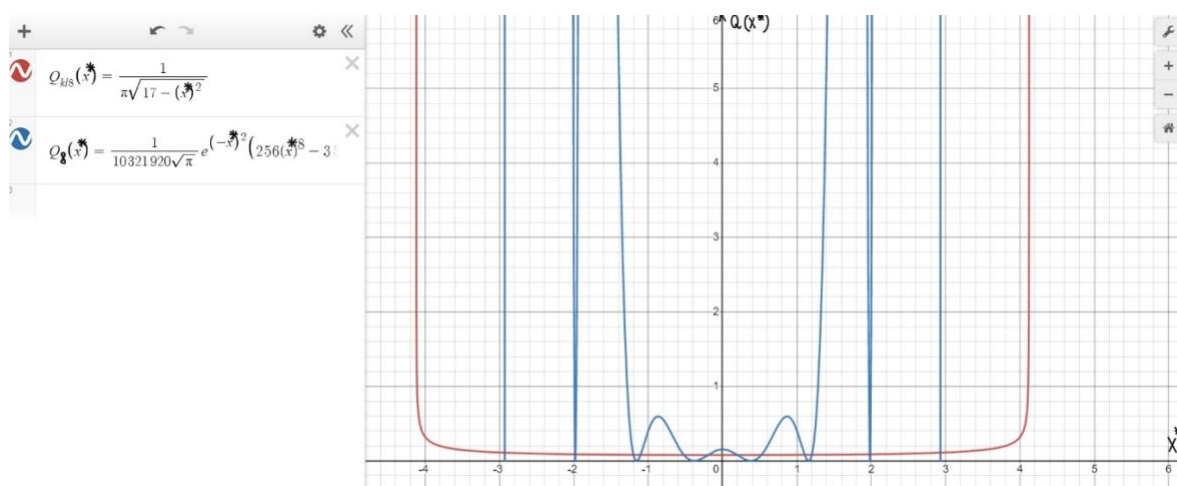


Рисунок 4. График плотности вероятности $Q_8(x^*)$ и $Q_{kl(8)}(x^*)$.

Изобразим найденные волновые функции гармонического осциллятора для n_1 (рис. 5) и n_2 (рис. 6):

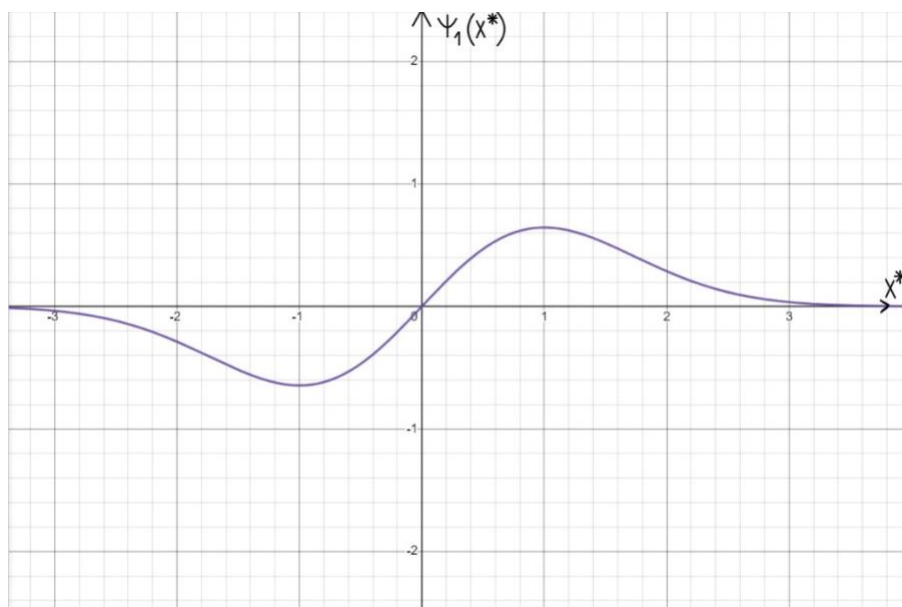


Рисунок 5. График волновой функции гармонического осциллятора при $n = n_1$.

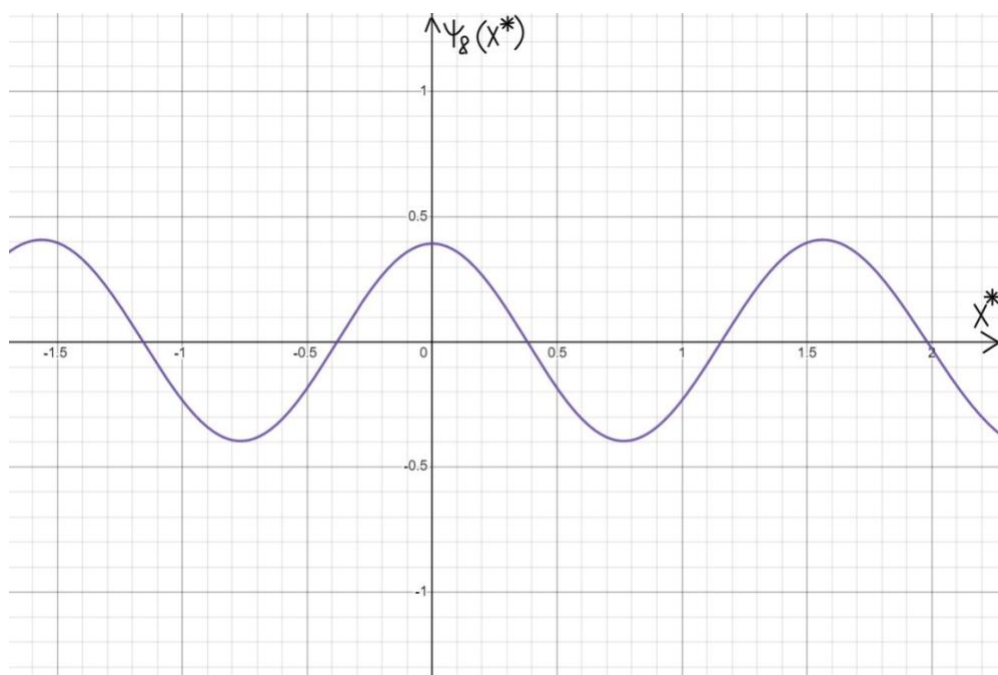


Рисунок 6. График волновой функции гармонического осциллятора при $n = n_2$.

Анализируя графики плотности вероятности для стационарных состояний с квантовыми числами 1 и 8, можно сделать следующий вывод: при значительной величине квантового числа n , плотность вероятности осциллятора приближается к классической кривой распределения. Она достигает максимума вблизи точек экспоненциального роста классической кривой распределения и резко экспоненциально убывает за пределами классической области движения.

Заключение

В данной курсовой работе рассматриваются стационарные состояния квантовой системы, при которых энергия имеет определенные значения. Была рассмотрена простейшая модель одномерного движения частицы с квантованием энергии (потенциальная яма с конечными стенками). С помощью трансцендентного уравнения были найдены значения энергий для основного и первого возбужденного состояний, а также была определена минимальная необходимая энергия для того, чтобы электрон мог покинуть яму. Определенная часть курсовой работы была посвящена квантовому осциллятору — системе, способной совершать гармонические колебания. В физике модель гармонического осциллятора играет важную роль, особенно при исследовании малых колебаний систем около положения устойчивого равновесия. Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в твердых телах, молекулах и т.д. Были найдены волновые функции при значениях n_1 и n_2 энергетических уровней гармонического осциллятора, а также была выведена формула, с помощью которой были определены плотности вероятностей, зависящие от безразмерной величины x^* .

Список использованных источников

1. Стационарное состояние // Большая советская энциклопедия : [в 30 т.] / гл. ред. А. М. Прохоров. — 3-е изд. — М. : Советская энциклопедия, 1969—1978.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.
4. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы: Учебное пособие. М.: Бином, 2014. -256 с.
5. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Учебное пособие для вузов. Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: Физматлит, 2016. — 800 с.
6. Петров С.В. Лекции по квантовой механике. М.: МГУ, 2003. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики: Учебное пособие. — СПб.: Издательство "Лань", 2004. — 664 с. [Электронный ресурс] <http://e.lanbook.com/>
7. Савельев И.В. Основы теоретической физики: Учебник. В 2 томах. Том 2. Квантовая механика. — СПб.: Издательство "Лань", 2005. — 432 с. [Электронный ресурс] <http://e.lanbook.com/>
8. Шпольский Э.В. Атомная физика. М.: Наука, 1984
9. Красов В.И., Паперный В.Л., Чумак В.В. Оптика. Компьютерный практикум: учеб. пособие: Ч.3.—Иркутск: Изд. Иркут. ун-т, 2005.
10. Практикум по атомной физике: Для физ. спец. вузов / В.Б. Авраменко, А.И.
11. Головатый, В.Е. Граков и др. Под ред. Л.И. Киселевского. Мн.: Университетское, 1989.