

Учреждение образования  
«Гомельский государственный университет  
имени Франциска Скорины»

**А. Н. ГОДЛЕВСКАЯ, В. Г. ШОЛОХ, А. А. ШАМЫНА**

**ФИЗИКА АТОМА  
И ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ:  
РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА  
И ИХ АНАЛИЗ В ПРОСТЕЙШИХ МОДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ**

Практическое пособие

для студентов специальностей  
6-05-0533-01 «Физика»,  
6-05-0533-02 «Прикладная физика»,  
6-05-0533-04 «Компьютерная физика»

Гомель  
ГГУ им. Ф. Скорины  
2025

УДК 539.18:539.19(075.8)  
ББК 22.384я73  
Г592

Рецензенты:

доктор физико-математических наук П. А. Хило,  
доктор физико-математических наук Ю. А. Гришечкин

Рекомендовано к изданию научно-методическим советом  
учреждения образования «Гомельский государственный  
университет имени Франциска Скорины»

**Годлевская, А. Н.**

Г592      Физика атома и введение в квантовую механику: решения  
стационарного уравнения Шрёдингера и их анализ в простейших  
модельных задачах : практическое пособие / А. Н. Годлевская,  
В. Г. Шолох, А. А. Шамына ; Гомельский гос. ун-т им. Ф. Ско-  
рины. – Гомель : ГГУ им. Ф. Скорины, 2025. – 40 с.

ISBN 978-985-32-0145-1

Практическое пособие подготовлено в целях оказания помощи студен-  
там в овладении базовыми знаниями, а также в подготовке к выполнению  
лабораторных работ по разделу «Основные положения квантовой механики»  
курса «Физика атома и введение в квантовую механику».

Адресовано студентам специальностей 6-05-0533-01 «Физика»,  
6-05-0533-02 «Прикладная физика», 6-05-0533-04 «Компьютерная физика».

**УДК 539.18:539.19(075.8)**  
**ББК 22.384я73**

**ISBN 978-985-32-0145-1**

© Годлевская А. Н., Шолох В. Г.,  
Шамына А. А., 2025  
© Учреждение образования  
«Гомельский государственный университет  
имени Франциска Скорины», 2025

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение .....	4
1. Стационарное уравнение Шрёдингера и его решения: теоретическое введение.....	5
1.1. Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики.	5
1.2. Решение стационарного уравнения Шрёдингера при описании одномерного движения микрочастицы .....	8
1.2.1. Движение частицы в области одномерной потенциальной ямы .....	9
1.2.1.1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме .....	10
1.2.1.2. Частица в асимметричной прямоугольной потенциальной яме .....	12
1.2.1.3. Микрочастица в параболической потенциальной яме .....	15
1.3. Движение микрочастицы в области одномерного потенциального барьера.....	20
1.3.1. Движение микрочастицы в области потенциального барьера-ступеньки .....	21
1.3.2. Движение микрочастицы в области одномерного прямоугольного потенциального барьера.....	25
2. Методические указания по выполнению лабораторных работ ..	30
2.1. Лабораторная работа 1. Изучение стационарных состояний микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме .....	30
2.2. Лабораторная работа 2. Изучение стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора .....	32
2.3. Лабораторная работа 3. Исследование вероятности прохождения электроном потенциального барьера.....	34
Литература.....	39

## ВВЕДЕНИЕ

В ходе выполнения лабораторных работ физического практикума студенты осваивают современные методы изучения физических систем, приобретают навыки экспериментальной работы не только на натурных установках, но и в виртуальной лаборатории с использованием компьютерных моделей и программных средств, учатся интерпретировать полученные результаты, применяя на практике теоретические знания.

В практическом пособии приведены краткие теоретические сведения для самостоятельной подготовки к выполнению лабораторных работ, методические указания относительно порядка их выполнения и вопросы, предназначенные для самоконтроля. Дополнительную информацию, необходимую при оформлении отчёта о лабораторной работе и подготовке к его защите, студенты могут найти в литературе, список которой имеется в практическом пособии, и в сети Интернет.

В целях акцентирования внимания на физической сути решений квантово-механических задач в данное издание включены лабораторные работы, в которых исследуются решения стационарного уравнения Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в простейших потенциальных полях: в области одномерной потенциальной ямы (с бесконечно высокими стенками, в форме асимметричного колодца с вертикальными стенками, а также параболической формы) и потенциальных барьеров различной конфигурации, – соответствующих квантово-механическим моделям реальных объектов физики атомов и молекул и составляющих основу для описания свойств твердого тела и наноструктурных материалов в квантовой механике.

Отметим также пропедевтическое значение содержания теоретического материала и лабораторных работ, предлагаемых к выполнению в настоящем практическом пособии. Осваивая методы решения стационарного уравнения Шрёдингера и алгоритмы анализа его решений в различных частных задачах, студенты смогут системно применить на практике знания, полученные при изучении курсов математического анализа, методов математической физики, дифференциальных уравнений, что будет способствовать подготовке к изучению курса квантовой механики.

# 1. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА И ЕГО РЕШЕНИЯ: ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ

## 1. 1. Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики

Квантовая механика является теорией, на основе которой объясняют основные свойства объектов микроскопических размеров: атомов, молекул, атомных ядер; в этой области науки изучают явления, происходящие в системах, линейные размеры которых порядка ( $10^{-7} \div 10^{-15}$ ) м. Основоположниками квантовой механики были Л. де Броиль, Н. Бор, Э. Шрёдингер, В. Гейзенберг, М. Борн, П. Дирак, В. Паули, Э. Ферми и др.

Основная задача квантовой механики состоит в отыскании функций состояния микрообъектов, обладающих корпускулярными и волновыми свойствами, в различных физических условиях. Для решения этой задачи необходимо *основное уравнение квантовой механики*, по своему значению в ней аналогичное уравнениям Ньютона в классической механике. Такое уравнение должно удовлетворять следующим требованиям:

1. Оно должно быть универсальным в том смысле, что состояние микрообъекта в любых физических условиях должно описываться  $\Psi$ -функцией, являющейся решением этого уравнения.

2. В общем случае это уравнение должно быть дифференциальным уравнением в частных производных по координатам и времени, так как оно должно описывать состояния движения частиц во времени и в пространстве.

3. В уравнении должна быть учтена связь полной энергии  $E$  и импульса  $p$ , характерная для классической механики, что обусловлено необходимостью выполнения *принципа соответствия*. В нерелятивистском приближении такая связь имеет вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U.$$

4. Уравнение должно быть линейным по  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Если функции  $\Psi_1(\vec{r}, t)$ ,  $\Psi_2(\vec{r}, t)$ , ...,  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ , ... описывают возможные состояния движения частицы в заданных условиях, то любая линейная комбинация этих функций  $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}, t)$  также описывает возможное

состояние движения этой частицы в тех же условиях. При этом величина  $|C_n|^2$  характеризует вероятность того, что при экспериментальных измерениях частица будет обнаружена в состоянии, которому соответствует функция  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ .

Уравнение, удовлетворяющее перечисленным требованиям, было постулировано в 1926 году австрийским физиком Э. Шрёдингером. Оно имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi,$$

где  $\Delta$  – оператор Лапласа;

$m$  – масса частицы;

$U(\vec{r}, t)$  – потенциальная энергия.

Это уравнение называют *временным (или общим) уравнением Шрёдингера*.

В физике стационарным состоянием называют состояние системы, в котором некоторые существенные для ее характеристики величины (разные в различных случаях) не изменяются с течением времени. В квантовой механике стационарным состоянием называют состояние, в котором энергия рассматриваемой системы имеет определенное (не изменяющееся с течением времени) значение.

Для микрообъекта, находящегося в стационарном состоянии, уравнение Шрёдингера имеет вид (*стационарное уравнение Шрёдингера*):

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0. \quad (1)$$

Решением уравнения Шрёдингера в общем случае является функция состояния  $\Psi(x, y, z, t)$ .

Посредством волновой функции  $\Psi(x, y, z, t)$  описывают состояние частицы. В этой функции заключена информация обо всех физических величинах, характеризующих движение частицы (координатах, импульсе, моменте импульса и др.). В частности, зная функцию  $\Psi(x, y, z, t)$ , можно определить *квадрат модуля*

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi, \quad (2)$$

который имеет смысл *плотности вероятности* обнаружить частицу в точке пространства с координатами  $x, y, z$  в момент времени  $t$ .

В соответствии с этим *вероятность* обнаружения частицы в малом объёме  $d\tau$  равна  $\Psi^*\Psi d\tau$ . При этом символом \* отмечена функция, комплексно сопряженная функции  $\Psi$ .

Направление, в котором наиболее вероятно перемещение частицы, определяется *вектором плотности потока вероятности*

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi), \quad (3)$$

модуль которого прямо пропорционален интенсивности потока частиц, движущихся в этом направлении. Физический смысл формул (2) и (3) раскрывается при проведении эксперимента, в котором производится  $N$  измерений для микрочастицы, находящейся в одном и том же состоянии. Тогда при большом количестве измерений выполняются соотношения

$$|\Psi|^2 \sim \frac{\Delta N'}{N}, \quad |\vec{j}| \sim \frac{\Delta N''}{N}, \quad (4)$$

где  $\Delta N'$  – число частиц, обнаруженных в единичном объеме вблизи точки  $(x, y, z)$ ;

$\Delta N''$  – результирующее число частиц, которые пересекли за единицу времени в направлении вектора плотности потока вероятности перпендикулярную ему площадку единичной площади.

Учитывая интерпретацию выражений (2) и (3), волновую функцию  $\Psi(x, y, z, t)$  называют также амплитудой вероятности. В стационарных состояниях величины (2) и (3) не зависят от времени и, если функция  $\Psi(x, y, z)$  вещественна, то  $\vec{j} = 0$ .

В соответствии со смыслом  $|\Psi|^2$  функция  $\Psi$  должна удовлетворять *стандартным* условиям: она должна быть во всем пространстве конечной, непрерывной и однозначной функцией, её первые производные по координатам также должны быть непрерывны.  $\Psi$ -функция должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi d\tau = 1. \quad (5)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера удовлетворяют этим требованиям при вполне конкретных условиях, например, при определённых дискретных значениях энергии, которая содержится в уравнении (1) в качестве параметра.

При анализе квантово-механической задачи полезно сопоставлять её с соответствующими задачами классической механики и оптики. В классической механике аналогом будет задача о движении частицы той же массы в силовом поле, в котором потенциальная энергия частицы  $U(x, y, z)$  такая же, как и в квантовой механике. На основе этой аналогии можно глубже понять особенности квантово-механического описания движения. Оптическим аналогом при условии, что  $E = \text{const}$ , является распространение монохроматической волны с циклической частотой  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  в неоднородной среде, у которой показатель преломления  $n$  изменяется в соответствии с выражением

$$n^2 = \frac{2me^2}{\hbar^2\omega^2} [E - U(\vec{r})]. \quad (6)$$

При этом импульс частицы, определенный на основе классической механики  $p_{\text{кл}} = \sqrt{2m(E - U)}$ , и волновое число, выражаемое в оптике через показатель преломления  $k_{\text{опт}} = \frac{\omega n}{c}$ , связаны между собой формулой де Бройля  $p = \hbar k$ . С использованием оптической аналогии во многих случаях удается без решения уравнений предвидеть и качественно объяснить поведение  $\Psi$ -функции, а следовательно, и частицы в заданных условиях.

## 1.2. Решение стационарного уравнения Шрёдингера при описании одномерного движения микрочастицы

Для демонстрации методики решения стационарного уравнения Шрёдингера и анализа его решений рассмотрим несколько простейших – так называемых одномерных – частных задач, в которых  $U = U(x)$  и можно рассматривать волновую функцию  $\Psi = \Psi(x, t)$ . В таких задачах применительно к стационарным состояниям волновая функция представима в виде

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) \exp(-i\omega t). \quad (7)$$

Уравнение Шрёдингера (1) в одномерных задачах записывается в форме

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)], \quad (8)$$

а в выражении (3) существенна только составляющая

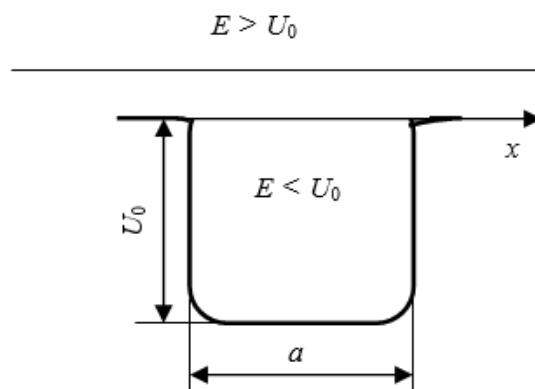
$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right).$$

Уравнение (8) решается особенно просто, когда в соседних областях пространства потенциальная энергия  $U = \text{const}$ , а на их границах изменяется скачком.

Рассмотрим методику решения стационарного уравнения Шрёдингера с учетом перечисленных свойств  $\Psi$ -функции в простейших модельных задачах квантовой механики: задачах о движении частицы в области потенциальных ям и потенциальных барьеров различной конфигурации.

### 1.2.1. Движение частицы в области одномерной потенциальной ямы

*Потенциальная яма* – ограниченная область пространства, определяемая физической природой взаимодействия частиц, в которой потенциальная энергия частицы меньше, чем вне её. Термин «потенциальная яма» происходит от вида графика, изображающего зависимость потенциальной энергии  $U$  частицы в силовом поле от её положения в пространстве (при описании одномерного движения – от координаты  $x$ ; рисунок 1). Зависимость такого вида возникает в поле сил притяжения.



Полная энергия  $E$  – сохраняющаяся величина, и поэтому изображена горизонтальной линией

Рисунок 1 – Схематическое изображение потенциальной ямы  $U(x)$

Характеристики потенциальной ямы – ширина  $a$  (расстояние, на котором проявляется действие сил притяжения) и глубина  $U_0$  (равная разности потенциальных энергий на «краю» ямы и на её «дне», соответствующем минимальной потенциальной энергии, которую часто удобно положить равной нулю). Основное свойство потенциальной ямы – способность удерживать частицу, полная энергия  $E$  которой меньше  $U_0$ ; такая частица внутри потенциальной ямы будет находиться в *связанном состоянии*.

### 1.2.1.1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме

Определим состояния частицы, находящейся в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме. При  $0 < x < a$  потенциальную энергию частицы будем считать равной нулю, а вне этого интервала – бесконечно большой (рисунок 2).

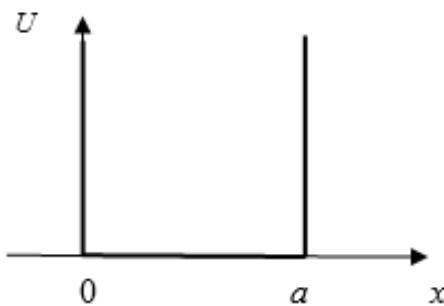


Рисунок 2 – Схематическое представление прямоугольной одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы

Выразим из уравнения (1) величину

$$\frac{\Delta\Psi}{\Psi} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E). \quad (9)$$

Так как вне интервала  $(0, a)$  потенциальная энергия бесконечно велика, то, анализируя выражение (9), видим, что за пределами потенциальной ямы  $\Psi = 0$ , и в таких модельных условиях частица при своем движении не может выйти за пределы области  $(0, a)$ .

Так как  $\Psi$ -функция должна быть непрерывна во всей области варьирования координаты  $x$ , то она обращается в нуль и в точках  $x = 0$  и  $x = a$ , то есть для функции  $\Psi(x)$  выполняются следующие граничные условия:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0.$$

Для частицы, движущейся внутри ямы – в области, где потенциальная энергия равна нулю, – уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0, \quad (10)$$

где принято обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (11)$$

Общее решение этого уравнения таково:

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

Границное условие  $\Psi(0) = 0$  выполнимо при  $B = 0$ , а из граничного условия  $\Psi(a) = 0$  следует, что

$$ak = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

Комбинируя соотношения (11) и (12), получим выражение для определения значений энергии микрочастицы в стационарных состояниях (уровней энергии):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (13)$$

Выражение (13) – *правило квантования энергии* частицы, локализованной в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Анализируя (13), видим, что минимальная энергия, соответствующая основному состоянию движения частицы, не равна нулю:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

Микрочастице в этом состоянии соответствует функция

$$\Psi_1 = A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right),$$

которая не обращается в нуль ни в одной точке интервала  $0 < x < a$ .

Из формулы (13) следует, что при уменьшении ширины ямы минимальная энергия микрочастицы увеличивается.

Амплитуду  $A$  (нормировочный множитель) можно определить, нормируя волновую функцию  $\Psi(x) = A \sin(kx)$  на единицу:

$$\int_0^a \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx = \frac{A^2 a}{2} = 1.$$

Тогда нормировочный множитель

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}},$$

и система собственных функций микрочастицы имеет вид

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (14)$$

Число стационарных состояний микрочастицы в бесконечно глубокой потенциальной яме не ограничено:  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ .

### 1.2.1.2. Частица в асимметричной одномерной прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим теперь состояния частицы, потенциальная энергия которой равна  $U_1$  при  $x \leq 0$ ;  $U_2$  – при  $x \geq a$ , а в интервале  $0 < x < a$  обращается в нуль (рисунок 3).

Так как значения энергии, определяющие конфигурацию потенциальной ямы, конечны, то частица может находиться в любой области одномерного пространства  $-\infty \leq x \leq \infty$ . Поэтому нужно найти волновую функцию, соответствующую микрочастице в каждой из трёх областей, отмеченных на рисунке 3.

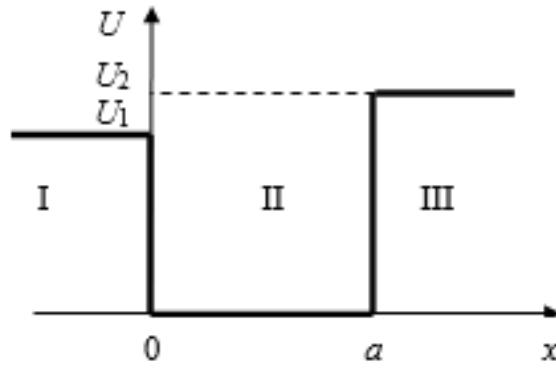


Рисунок 3 – Схематическое изображение одномерной асимметричной прямоугольной потенциальной ямы

Уравнение Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в областях I, II, III, соответственно имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi''_I(x) + k_1^2 \Psi_I(x) &= 0, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_1)}{\hbar^2}}; \\ \Psi''_{II}(x) + k_2^2 \Psi_{II}(x) &= 0, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \\ \Psi''_{III}(x) + k_3^2 \Psi_{III}(x) &= 0, \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Выделим частный случай, когда значение полной энергии частицы удовлетворяет условию  $E < U_1 < U_2$ . При этом решениями уравнения Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в областях I, II, III, соответственно будут функции

$$\begin{aligned} \text{при } x \leq 0 \quad \Psi_I &= a \exp(k_1 x), \\ \text{при } 0 > x > a \quad \Psi_{II} &= b \sin(k_2 x + \alpha), \\ \text{при } x \geq a \quad \Psi_{III} &= c \exp(-k_3 x) \end{aligned}$$

Учитывая непрерывность  $\Psi$ -функции и её производной на границах потенциальной ямы, запишем систему трансцендентных уравнений

$$\tg(\alpha) = \frac{k_2}{k_1}; \quad \tg(k_2 a + \alpha) = \frac{-k_2}{k_3}. \quad (16)$$

Решая графически систему этих уравнений с учётом определений, введённых для величин  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$  в (15), получим набор собственных значений энергии  $E$  микрочастицы, образующих дискретный спектр.

Число значений энергии в рассматриваемой задаче конечно и зависит от высоты более низкого потенциального барьера. Высота более низкого потенциального барьера  $U_1 = U_0$ , при которой существует энергетический уровень  $E_n$ , удовлетворяющий условию  $\sqrt{\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2}} = n\pi$ , в котором  $n = 1, 2, 3, \dots, n_{\max}$ . Например, для электрона, который движется в потенциальной яме, имеющей ширину  $a = 0,6 \cdot 10^{-9}$  м и ограниченной потенциальными барьерами высотой  $U_1 = 5$  эВ и  $U_2 = 10$  эВ, имеются два решения системы (15):

$$E_1 = 0,67 \text{ эВ}, E_2 = 2,59 \text{ эВ},$$

то есть внутри потенциальной ямы для рассматриваемой частицы реализуемы только два стационарных состояния; соответствующие им два уровня энергии показаны на рисунке 4.

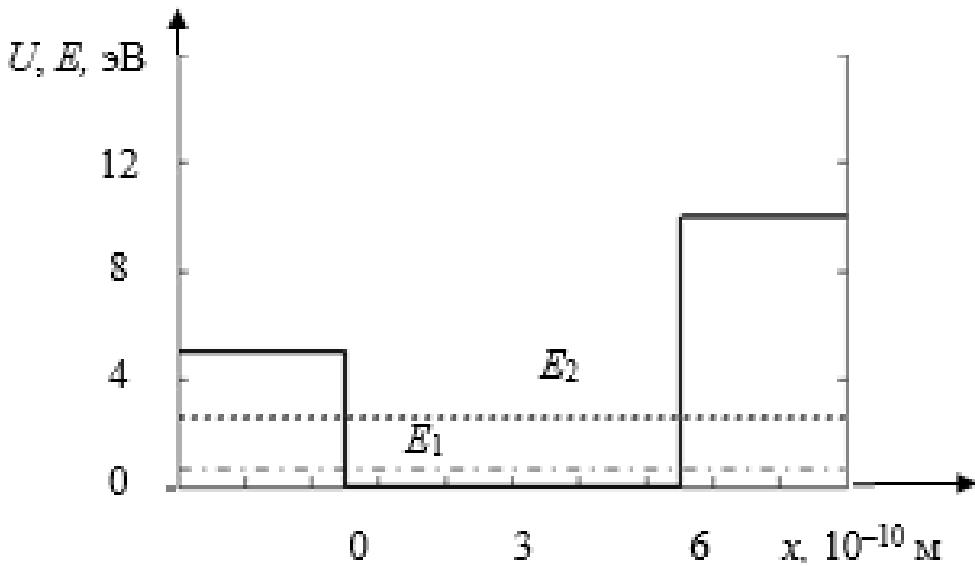


Рисунок 4 – Собственные значения энергии электрона

В результате решения уравнения (1) определяются также собственные функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , соответствующие состояниям с энергиями  $E_1$  и  $E_2$ . Зависимость квадрата модуля этих функций состояния от координаты  $x$  для электрона в указанных условиях изображена на рисунке 5.

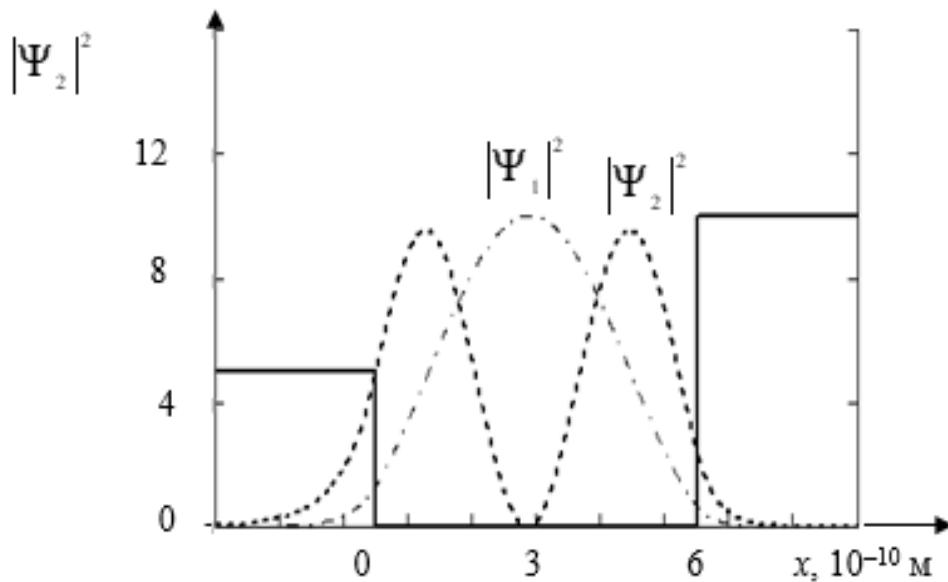


Рисунок 5 – Распределение плотности вероятности обнаружения электрона

Анализируя графики функций  $|\Psi_1|^2$  и  $|\Psi_2|^2$ , видим, что распределение плотности вероятности обнаружить электрон в области потенциальной ямы в каждом из возможных состояний различно. Ни в одном из этих состояний плотность вероятности обнаружения частицы не равна нулю на границе областей с разной потенциальной энергией, как это имело место при движении частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Кроме того, существует вероятность обнаружения частицы за пределами потенциальной ямы, быстро уменьшающаяся при удалении от её границ.

### 1.2.1.3. Микрочастица в параболической потенциальной яме

В классической физике гармоническим осциллятором называют частицу, на которую действует сила, прямо пропорциональная величине отклонения частицы от положения равновесия и направленная к нему, и решение задачи о его состояниях возможно на основе второго закона Ньютона (динамическое описание). В квантовой механике информацию о состояниях гармонического осциллятора получают в результате решения уравнения Шредингера.

Пусть осциллятор одномерен и положению его равновесия соответствует точка  $x = 0$ . Тогда потенциальная энергия гармонического осциллятора (и явный вид оператора потенциальной энергии) определяется функцией

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad (17)$$

где  $k = m\omega_0^2$  – коэффициент упругости;

$m$  – масса колеблющейся частицы;

$\omega_0$  – циклическая частота колебаний.

В положении равновесия потенциальная энергия минимальна ( $U(x=0)=0$ ).

Следовательно, в квантовой механике задачу о гармоническом осцилляторе можно свести к задаче о движении частицы в параболической потенциальной яме (рисунок 6).

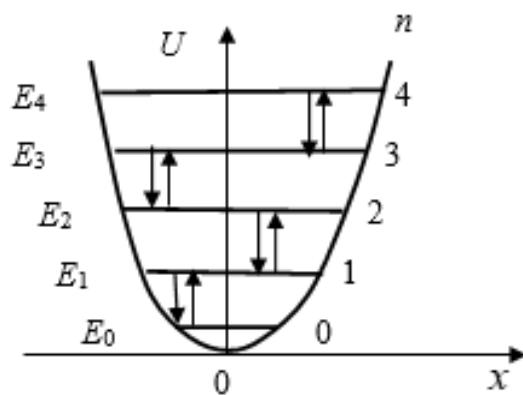


Рисунок 6 – Потенциальная яма, соответствующая гармоническому осциллятору

В такой модельной ситуации уравнение Шрёдингера для стационарных состояний одномерного осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \Psi = E\Psi. \quad (18)$$

Введём новые переменные:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega_0}; \quad \xi = x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega_0}} \quad (19)$$

и преобразуем (18) к форме:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0. \quad (20)$$

Уравнение (20) имеет непрерывные решения во всей области изменения параметра  $\xi$  от  $-\infty$  до  $+\infty$  только при условии, что безразмерный коэффициент  $\lambda$  принимает значения

$$\lambda_n = 2n + 1, \quad (21)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$

Комбинируя выражения для  $\lambda_n$  (20) и (21), найдем возможные значения энергии гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

Число  $n$ , определяющее номер энергетического уровня, называют *квантовым числом*. Анализируя (22), видим, что спектр энергий гармонического осциллятора дискретен (то есть энергия квантована) и энергетические уровни эквидистантны (рисунок 6). Кроме того, из (22) следует, что при  $n = 0$  осциллятор имеет минимальную (так называемую «нулевую») энергию, отличную от нуля:  $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \neq 0$ , – то есть осциллятор не может находиться на дне потенциальной ямы. Нулевой энергии соответствуют *нулевые колебания* осциллятора.

Сравнивая диаграммы энергетических уровней для частиц, находящихся в бесконечно глубокой потенциальной яме, потенциальной яме конечной глубины и для гармонического осциллятора, видим, что *закономерность в изменении возможных значений энергии микрообъекта зависит от формы потенциальной кривой  $U(x)$ .*

Волновая функция гармонического осциллятора  $\Psi_n$ , соответствующая собственному значению энергии  $E_n$ , выражается формулой:

$$\Psi_n(\xi) = C_n \cdot P_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad (23)$$

где  $C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{n}}}$  – нормирующий множитель;

$P_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2)$  – полином Эрмита  $n$ -го порядка.

Собственную функцию осциллятора можно представить также в форме

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n(\xi), \quad (24)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}.$$

Четность функций (23) и (24) совпадает с четностью квантового числа  $n$ . Число точек, в которых значения функций  $\Psi_n(x)$  равны нулю, – число узлов – равно квантовому числу  $n$ .

Плотность вероятности нахождения осциллятора на расстоянии  $x$  от положения равновесия определяется квадратом модуля функции состояния  $\Psi_n(x)$ . На рисунке 7 сплошными кривыми изображены распределения плотности вероятности обнаружения микрочастицы в состояниях  $\Psi_n(x)$  при  $n = 0, 1, 2$ . Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат *классического осциллятора* с энергиями  $E_0, E_1, E_2$  (соответственно фрагменты *a, b, c* на рисунке 7). Штриховые кривые соответствуют *классическому распределению* плотности вероятности  $P_{\text{кл}}(x) = \frac{dw_{\text{кл}}}{dx}$ , где  $dw_{\text{кл}}$  – вероятность нахождения материальной точки на участке от  $x$  до  $x + dx$ .

Классический осциллятор колеблется с частотой  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ,

где  $m$  – масса частицы, и испускает излучение только частоты  $\omega_0$ .

В соответствии с *правилами отбора по колебательному квантовому числу n* разрешенными являются только квантовые переходы, в которых это квантовое число изменяется на единицу (рисунок 6):

$$\Delta n = \pm 1. \quad (25)$$

В квантовой механике это правило выводится при расчете вероятностей переходов между стационарными состояниями осциллятора.

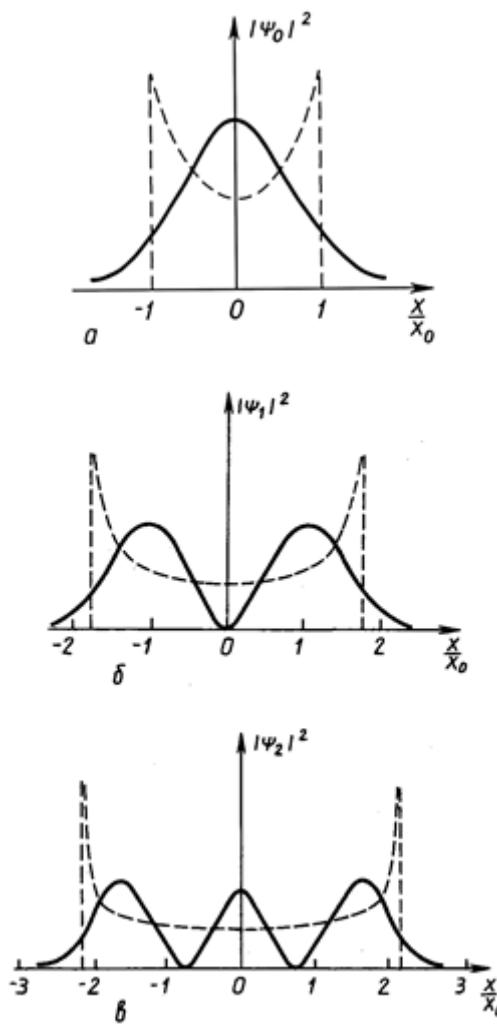


Рисунок 7 – Распределение плотности вероятности для гармонического осциллятора в состояниях с энергией  $E_0$ ,  $E_1$ ,  $E_2$

Применяя в правиле частот Бора формулы (22) и (25), получим, что в спектре излучения квантово-механического гармонического осциллятора должна регистрироваться *только одна* спектральная линия, которой соответствует частота  $\omega_0$ , что соответствует результату классического описания.

Модель линейного гармонического осциллятора широко используется в приложениях. Выбирая подходящим образом систему координат (задавая так называемые «нормальные координаты») описание движения механической системы частиц, совершающих малые колебания, можно свести к описанию движения совокупности независимых гармонических осцилляторов.

Во всех трех рассмотренных выше задачах показано, что минимальное возможное значение полной энергии микрочастицы, стационарно

движущейся в потенциальной яме, отлично от нуля:  $E_1 \neq 0$  (частица имеет так называемую «нулевую энергию»). Микрочастица не может находиться в состоянии покоя, а ее полная энергия не может быть равна наименьшему значению потенциальной энергии, соответствующему «дну» потенциальной ямы. Наличие такого состояния означало бы, что координата микрочастицы точно известна, что несовместимо с соотношением неопределенностей для координаты и соответствующей ей проекции импульса. Нулевая энергия в заданной потенциальной яме  $U(x)$  не может быть отнята у микрочастицы. Для изменения нулевой энергии необходимо изменить потенциальную яму. Подробный анализ этой проблемы описан в учебном пособии Д. В. Сивухина (Курс общей физики, т. 5, ч. 1, § 22).

### 1.3. Движение микрочастицы в области одномерного потенциального барьера

*Потенциальный барьер* – ограниченная в пространстве область, в которой потенциальная энергия частицы, движущейся в силовом поле, больше, чем по обе стороны от неё. За пределами этой области потенциальная энергия частицы более или менее резко уменьшается (рисунок 8). В некоторой точке  $x = x_0$  потенциальная энергия частицы максимальна и равна  $U_0$ . Это значение потенциальной энергии называют *высотой потенциального барьера*. Отрезок  $d$  – *ширина потенциального барьера*. Потенциальный барьер соответствует силам отталкивания.

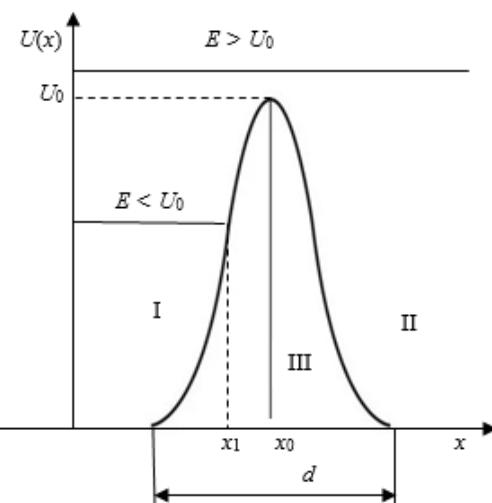


Рисунок 8 – Потенциальный барьер, соответствующий движению частицы вдоль оси  $x$

Потенциальный барьер делит пространство на две области (I и II), в которых потенциальная энергия частицы меньше, чем внутри потенциального барьера (область III).

Целью квантово-механического рассмотрения задачи о прохождении частицы через потенциальный барьер является определение коэффициента отражения  $R$ , являющегося мерой вероятности того, что частица останется в «добрьерной» области пространства, и коэффициента прозрачности (прохождения)  $D$ , характеризующего вероятность того, что частица преодолеет потенциальный барьер. Эти коэффициенты можно выразить через плотности потока частиц, движущихся к барьеру и от него:

$$R = \left| \frac{j_{x\text{отр}}}{j_{x\text{пад}}} \right|; \quad D = \left| \frac{j_{x\text{прош}}}{j_{x\text{пад}}} \right|. \quad (26)$$

Плотность потока частиц можно выразить через их концентрацию и скорость движения:  $j_x = n_x v$ . Так как  $n_x \sim |\Psi|^2$ , а  $v \sim p \sim k$ , то

$$j_x \sim |\Psi|^2 k. \quad (27)$$

Рассмотрим в качестве частных примеров методику решения задач о движении микрочастицы в области одномерных потенциального барьера-ступеньки и прямоугольного потенциального барьера.

### 1.3.1. Движение микрочастицы в области потенциального барьера-ступеньки

Рассмотрим сначала одномерное движение частицы, имеющей массу  $m$  и энергию  $E$ , вдоль оси  $x$  в области одномерного прямоугольного потенциального барьера бесконечной ширины, конфигурация которого представлена на рисунке 9. Обозначим высоту потенциального барьера  $U_0$ .

Так как  $U_0$  не зависит от времени, следует решить стационарное уравнение Шрёдингера для частицы, которая движется свободно в области пространства I –

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} = E\Psi_1(x), \quad (28)$$

и в потенциальном поле  $U_0$  в области пространства II (рисунок 9) –

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} + U_0 \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x). \quad (29)$$

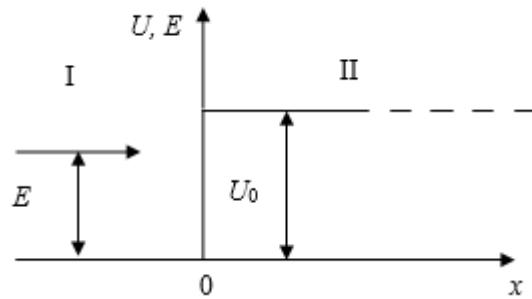


Рисунок 9 – Одномерное движение частицы  
в области прямоугольного потенциального барьера бесконечной ширины

Введём обозначения

$$\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = k_1, \quad \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} = k_2. \quad (30)$$

Общее решение уравнения (28) имеет вид

$$\Psi_I = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x) \equiv \Psi_I^{(+)} + \Psi_I^{(-)}. \quad (31)$$

Если учесть, что в стационарных состояниях волновая функция гармонически зависит от времени, то  $\Psi_I$  следует трактовать как суперпозицию падающей  $\Psi_I^{(+)}$  и отражённой  $\Psi_I^{(-)}$  волн де Броиля.

Вид решений уравнения (28) зависит от соотношения энергии частицы  $E$  и высоты потенциального барьера  $U_0$ .

Выделим два частных случая.

Пусть  $E \geq U_0$ . При этом решением уравнения (28) является функция

$$\Psi_{II} = a_2 \exp(ik_2 x) \equiv \Psi_{II}^{(+)}. \quad (32)$$

Чтобы выразить амплитуды отраженной ( $b_1$ ) и прошедшей ( $a_2$ ) волн через амплитуду падающей волны, воспользуемся условиями непрерывности волновой функции и первой её производной на границе потенциального барьера, из которых следует, что при  $x = 0$

$$\Psi_{\text{I}}(x=0) = \Psi_{\text{II}}(x=0), \quad 1 + b_1 = a_2; \quad (33)$$

$$\Psi'_{\text{I}}(x=0) = \Psi'_{\text{II}}(x=0), \quad k_1 - k_1 b_1 = k_2 a_2. \quad (34)$$

Решая систему уравнений (33) и (34), получим

$$b_1 = a_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad a_2 = a_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (35)$$

Без нарушения общности можно принять амплитуду падающей волны равной единице:  $a_1 = 1$ .

Коэффициент отражения  $R$  на основе аналогии между дебройлевскими и световыми волнами определяется как отношение интенсивностей отражённой и падающей волн де Бройля:

$$R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}.$$

Если считать амплитуду падающей волны де Бройля равной единице ( $a_1 = 1$ ), то коэффициент отражения волны де Бройля от потенциального барьера определяется величиной

$$R = |b_1|^2. \quad (36)$$

Коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер  $D$  также вводится на основе аналогии между дебройлевскими и световыми волнами и определяется как отношение интенсивностей прошёлшей и падающей волн де Бройля:

$$D = \frac{|a_2|^2}{|a_1|^2} \cdot \frac{k_2}{k_1} = |a_2|^2 \frac{k_2}{k_1}. \quad (37)$$

В формуле (37) принято, что  $|a_1| = 1$ .

Тогда в соответствии с формулами (36) и (37) коэффициенты отражения и прохождения частицы будут определяться следующим образом:

$$R = |b_1|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (38)$$

$$D = \frac{|a_2|^2 k_2}{|a_1|^2 k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (39)$$

Анализируя формулу (39), заметим, что коэффициент прозрачности барьера-ступеньки зависит от полной энергии микрочастицы. Данная зависимость, рассчитанная для электрона при  $U_0 = 2,14$  эВ, изображена на рисунке 10.

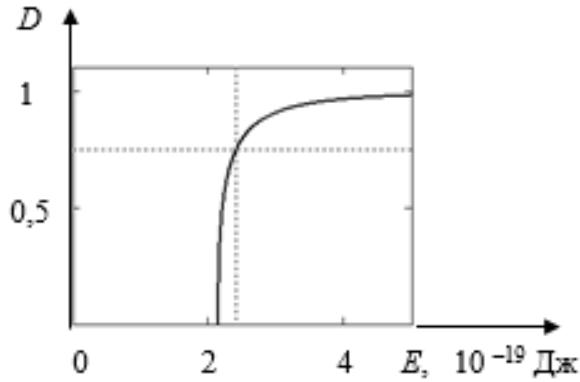


Рисунок 10 – Зависимость коэффициента прозрачности барьера-ступеньки высотой  $U_0 = 2,14$  эВ от энергии электрона

Этот результат существенно отличается от того, который получен при описании движения частицы в рамках классической теории. В соответствии с представлениями классической механики частица, энергия которой  $E \geq U_0$ , всегда (то есть с вероятностью, равной единице) проникает в область барьера (с полной потерей кинетической энергии, если  $E = U_0$ ). При квантово-механическом описании движения частицы при  $E \geq U_0$  имеется определённая вероятность отражения частицы от потенциального барьера; отражение будет полным (то есть  $R = 1$ ), если  $E = U_0$ .

Предположим теперь, что  $E < U_0$ . При этом условии решение уравнения (28), удовлетворяющее требованию конечности  $\Psi$ -функции, в области II имеет вид

$$\Psi_{\text{II}} = a'_2 \exp(-kx), \quad (40)$$

где

$$ik = k_2, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (41)$$

В рассматриваемых условиях амплитуды  $a'_2$  и  $b_1$  являются комплексными величинами, и коэффициент отражения равен единице:

$$R = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2 = 1. \quad (42)$$

Коэффициент прозрачности при этом

$$D = 1 - R = 0. \quad (43)$$

Несмотря на это, имеется вероятность проникновения частицы внутрь потенциального барьера. Действительно,

$$|\Psi_{\text{II}}|^2 = |a'_2|^2 \exp(-2kx) \neq 0. \quad (44)$$

Этот результат противоречит полученному в классической механике выводу о невозможности проникновения частицы в область потенциального барьера, если  $E < U_0$ .

### 1.3.2. Движение микрочастицы в области одномерного прямоугольного потенциального барьера

Найдём далее коэффициент прозрачности  $D$  одномерного прямоугольного потенциального барьера шириной  $d$  и высотой  $U_0$ , схематически изображённого на рисунке 11, в предположении, что для движущейся к нему частицы выполняется условие  $E < U_0$ .

В соответствии с методикой, использованной при решении предыдущей задачи, можем получить решение уравнения Шредингера, соответствующее движению частицы в каждой из трёх областей пространства I, II, III (рисунок 11) соответственно:

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{I}} &= a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x); \\ \Psi_{\text{II}} &= a_2 \exp(-kx) + b_2 \exp(kx); \\ \Psi_{\text{III}} &= a_3 \exp(ik_1(x-d)), \end{aligned} \quad (45)$$

где величины  $k_1$  и  $k$  определяются по формулам (30) и (41).

Коэффициент прозрачности в рассматриваемых условиях определяется по формуле

$$D = |a_3|^2. \quad (46)$$

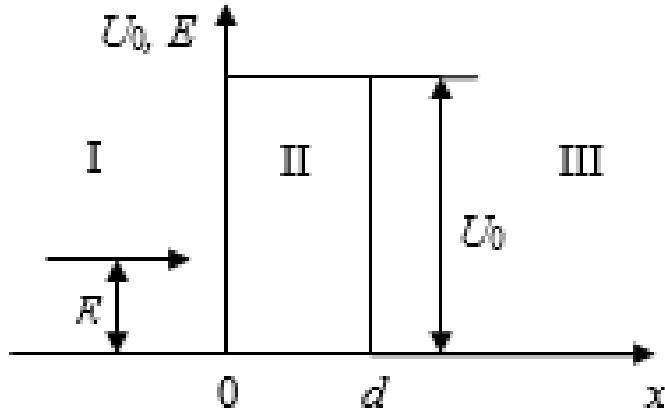


Рисунок 11 – Одномерное движение частицы  
в области прямоугольного потенциального барьера конечной ширины

Амплитуду волны де Броиля  $a_3$  найдём, решая систему линейных алгебраических уравнений, представляющих условия непрерывности волновой функции и её первой производной на границах I и II, а также II и III областей пространства. В результате получим

$$a_3 = \frac{4kk_1}{(k_1 + ik)(k - ik)} \exp(-kd). \quad (47)$$

Тогда коэффициент прохождения имеет вид:

$$D = |\Psi_{\text{III}}|^2 = |a_3|^2 = \frac{16}{\left(\frac{k}{k_1} + \frac{k_1}{k}\right)^2} \cdot \exp(-2kd). \quad (48)$$

Полученный результат с учетом выражений (28) и (41) можно записать следующим образом:

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right). \quad (49)$$

Если  $k_1$  и  $k$  – величины одного порядка, то  $D_0$  имеет значение близкое к единице, и коэффициент прозрачности  $D$  определяется экспоненциальным множителем. Отметим также, что в области III частица имеет ту же энергию  $E$ , что и в области I.

Прохождение частицы, энергия которой  $E < U_0$ , через потенциальный барьер называют *туннельным эффектом*. Туннельный эффект существует только для систем, имеющих микроскопические размеры и малую массу. Чем уже потенциальный барьер и чем меньше разность  $U_0 - E$ , тем больше вероятность того, что частица пройдет сквозь него.

Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера, высота которого  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж и ширина  $d = 5 \cdot 10^{-9}$  м, от полной энергии электрона при  $E < U_0$  изображена на рисунке 12.

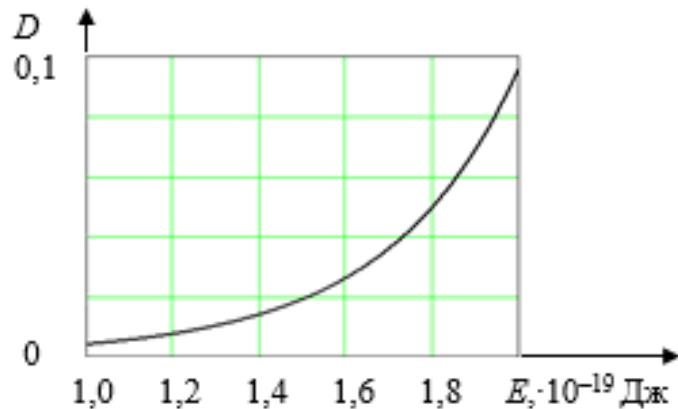


Рисунок 12 – Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера от полной энергии электрона ( $E < U_0$ )

При решении задачи об определении коэффициентов прохождения и отражения микрочастиц при условии  $E > U_0$  также получаются результаты, противоречащие выводам классического описания.

В соответствии с классической механикой частицы с энергией  $E$  большей  $U_0$  не должны отражаться от барьера:  $R = 0$ ,  $D = 1$ , и барьер полностью прозрачен. В квантовой механике даже при  $E > U_0$ , как правило,  $R > 0$ ,  $D < 1$ , и некоторая доля частиц отражается от барьера так же, как частично отражаются световые волны на границе двух сред.

Отражение от потенциального барьера частиц, у которых  $E > U_0$ , называют *надбарьерным отражением*. На рисунке 13 иллюстрирована зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного

потенциального барьера от полной энергии электрона, движущегося в области потенциального барьера, высота которого  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж и ширина  $d = 5 \cdot 10^{-9}$  м. Осцилляции на графике зависимости  $D(E)$  объясняются интерференцией волн де Броиля, которые являются решениями уравнения Шрёдингера в рассматриваемых здесь условиях.

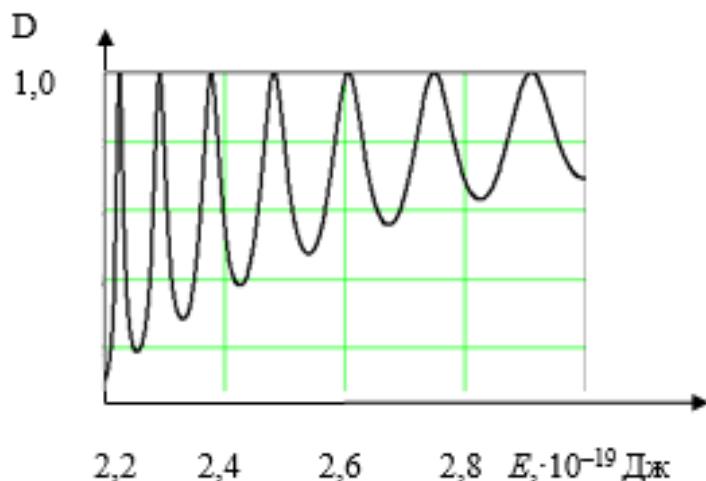


Рисунок 13 – Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера от полной энергии электрона ( $E > U_0$ )

В обеих рассмотренных ситуациях (при  $E < U_0$  и при  $E > U_0$ ) имеет место равенство  $R + D = 1$ , что соответствует выполнению закона сохранения числа частиц в рассматриваемых процессах.

Можно показать, что при  $E \gg U_0$  результаты квантовой механики совпадают с результатами классической механики (выполняется принцип соответствия).

Решение вышерассмотренных задач можно осуществить в математической системе Mathcad, для чего составлены специальные программы.

## Вопросы для самоконтроля

1. Каким требованиям удовлетворяет основное уравнение квантовой механики в нерелятивистском приближении?
2. Запишите стационарное и общее уравнения Шрёдингера.
3. Каков физический смысл решений уравнения Шрёдингера?
4. Каковы стандартные условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шрёдингера?

5. Каковы логические этапы решения стационарного одномерного уравнения Шрёдингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме бесконечной глубины?

6. Каковы логические этапы решения стационарного одномерного уравнения Шрёдингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины?

7. Какова методика решения квантово-механической задачи о гармоническом осцилляторе и особенности решений этой задачи?

8. Как трактуется физический смысл коэффициентов отражения и прохождения при движении частицы в области потенциального барьера?

9. Какова последовательность решения задачи о стационарных состояниях частицы, проходящей через прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины? Каковы особенности её решений?

10. Как оценить вероятность прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины?

## **2. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ВЫПОЛНЕНИЮ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ**

### **2.1. Лабораторная работа 1. Изучение стационарных состояний микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме**

**Цель работы:** определить функции состояния и возможные значения энергии электрона, находящегося в прямоугольной одномерной асимметричной потенциальной яме; исследовать влияние основных параметров потенциальной ямы на спектр энергии электрона и вероятность его обнаружения в заданной области пространства.

#### ***Задание 1. Подготовка к выполнению компьютерного эксперимента***

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.
2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задачам о частице, движущейся в области асимметричной прямоугольной потенциальной ямы.
3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

#### ***Задание 2. Исследование влияния ширины прямоугольной асимметричной потенциальной ямы на решения стационарного уравнения Шрёдингера***

1. Задайте конкретные значения ширины потенциальной ямы порядка  $10^{-9}$  м и высоты стенок асимметричной потенциальной ямы, выбирая их в диапазоне (2 ÷ 12) эВ и с использованием компьютерной модели, реализованной на основе приложения Mathcad, определите возможные значения полной энергии электрона и распределение плотности вероятности его обнаружения в каждом состоянии. Сохраните значения заданных параметров и результаты (значения полной энергии в стационарных состояниях, диаграмму энергетических уровней, распределение плотности вероятности электрона) в электронном документе Microsoft Word. Сохранение информации выполните посредством опций «Вставка \ Специальная вставка \ Точечный рисунок». Возможно также сохранение скриншота нажатием клавиши Print Screen.

2. Повторите п.1 при тех же значениях высоты стенок потенциальной ямы, задавая  $3 \div 5$  значений её ширины в пределах, указанных преподавателем.

3. Систематизируйте полученные результаты и, анализируя их, установите, как изменяется при увеличении ширины потенциальной ямы:

- а) число возможных состояний электрона;
- б) энергия электрона в основном состоянии;

в) вероятность обнаружения электрона, находящегося в основном состоянии, за пределами потенциальной ямы (используйте для этого метод графического интегрирования);

г) используя решения в условиях, при которых получено три стационарных состояния электрона, определите в каждом из них значения координат, соответствующие максимальной плотности вероятности обнаружения частицы. Для этого используйте опцию «Трассировка» в программной среде Mathcad.

4. Сформулируйте выводы.

***Задание 3. Исследование влияния относительной высоты стенок прямоугольной асимметричной потенциальной ямы на решения стационарного уравнения Шрёдингера***

1. Задайте конкретные значения ширины потенциальной ямы порядка  $10^{-9}$  м и высоты стенок асимметричной потенциальной ямы, выбирая их в диапазоне ( $2 \div 12$ ) эВ и с использованием компьютерной модели, реализованной на основе приложения Mathcad, определите возможные значения полной энергии электрона и распределение плотности вероятности его обнаружения в каждом состоянии. Сохраните значения заданных параметров и результаты (значения полной энергии в стационарных состояниях, диаграмму энергетических уровней, распределение плотности вероятности электрона) в электронном документе Microsoft Word.

2. Повторите п.1 при тех же значениях ширины потенциальной ямы и высоты потенциального барьера  $U_1$  и значениях высоты потенциального барьера  $U_2$ , указанных преподавателем.

3. Систематизируйте полученные результаты и, анализируя их, установите, как при увеличении отношения  $\frac{U_2}{U_1}$  изменяется:

- а) число возможных состояний электрона;
- б) энергия электрона в основном состоянии;

в) отношение вероятностей обнаружения электрона в области  $x < 0$  и в области  $x > a$  в его основном состоянии (используйте для этого метод графического интегрирования);

г) координата точки, в которой наиболее вероятно обнаружить микрочастицу в основном состоянии;

д) величина  $\frac{E_{i+1} - E_i}{E_{i+2} - E_{i+1}}$  (используйте решения в условиях, при ко-

торых получено не менее трёх стационарных состояний электрона; для определения значений энергии используйте опцию «Трассировка» в программной среде Mathcad).

4. Истолкуйте результат, относящийся к основному состоянию микрочастицы внутри потенциальной ямы, на основе соотношений неопределенностей.

5. Сформулируйте выводы.

## **2.2. Лабораторная работа 2. Изучение стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора**

**Цель работы:** проанализировать влияние жесткости и массы одномерного гармонического осциллятора на собственные значения его энергии и распределение плотности вероятности обнаружения частицы в различных состояниях.

### ***Задание 1. Подготовка к выполнению лабораторной работы***

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.

2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задаче об одномерном гармоническом осцилляторе.

3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

### ***Задание 2. Определение явного вида собственных функций гармонического осциллятора и их исследование***

1. Пользуясь формулами (23) и (24), запишите в явном виде выражения собственных функций гармонического квантово-механического осциллятора, соответствующие первым трем его стационарным состояниям.

2. С использованием результатов выполнения п. 1 задания 2 запишите выражения для плотности вероятности обнаружения осциллятора в каждом из первых трех стационарных состояний.

3. Определите аналитически координаты точек с нулевой и максимальной вероятностью обнаружения осциллятора.

4. Систематизируйте полученные результаты в таблицу, составленную самостоятельно.

5. Проанализируйте полученные результаты. Сделайте выводы о количестве нулей у волновых функций, соответствующих стационарным состояниям гармонического осциллятора.

### ***Задание 3. Исследование влияния жёсткости гармонического осциллятора на решения стационарного уравнения Шрёдингера***

1. Пользуясь приложением Mathcad, получите решения уравнения Шрёдингера для собственных функций и собственных значений энергии гармонического осциллятора, масса которого  $m = 1,0 \cdot 10^{-26}$  кг, выбирая значение жесткости из интервала  $k = (1 \div 30)$  Дж/м<sup>2</sup>. Сохраните значения заданных параметров и результаты (таблицу значений полной энергии, диаграмму энергетических уровней и зависимости плотности от координаты  $x$ ) в электронном документе Microsoft Word.

2. Повторите п.1 задания 3 при трёх – четырёх других значениях жёсткости осциллятора из вышеуказанного интервала.

3. Проводя графическое интегрирование, определите вероятность обнаружения осциллятора за пределами потенциальной ямы в каждом из стационарных состояний. Систематизируйте и сравните результаты, полученные при выполнении задания 3.

4. Проанализируйте влияние жёсткости осциллятора на разность энергий, соответствующих значениям колебательного квантового числа  $n$  и  $n+1$ , и на вероятность обнаружения осциллятора, находящегося в основном состоянии, за пределами параболической потенциальной ямы.

### ***Задание 4. Исследование влияния приведённой массы гармонического осциллятора на решения стационарного уравнения Шрёдингера***

1. Пользуясь приложением Mathcad, получите решения уравнения Шрёдингера для собственных функций и собственных значений энергии гармонического осциллятора, жёсткость которого  $k = 10$  Дж/м<sup>2</sup>, выбирая значение приведённой массы из интервала  $m = (1 \div 10) \cdot 10^{-26}$  кг.

2. Сохраните значения заданных параметров и результаты (таблицу значений полной энергии, диаграмму энергетических уровней и зависимости плотности вероятности от координаты  $x$ ) в электронном документе Microsoft Word.

3. Повторите п. 1 при трёх – четырёх других значениях приведённой массы осциллятора из вышеуказанного интервала.

4. Проводя графическое интегрирование, определите вероятность обнаружения осциллятора за пределами потенциальной ямы в каждом из стационарных состояний. Систематизируйте и сравните результаты, полученные при выполнении задания 4.

5. Проанализируйте влияние приведённой массы осциллятора на разность энергий, соответствующих значениям колебательного квантового числа  $n$  и  $n+1$ , и на вероятность обнаружения осциллятора, находящегося в основном состоянии, за пределами параболической потенциальной ямы.

6. Сравните результаты аналитического определения количества нулей у квадрата модуля волновой функции с результатами компьютерных экспериментов.

7. Сформулируйте общие выводы. Оформите отчет о лабораторной работе.

## **2.3. Лабораторная работа 3. Исследование вероятности прохождения электроном потенциального барьера**

**Цель работы:** определить вероятность прохождения электрона через одномерные прямоугольные потенциальные барьеры разной конфигурации; проанализировать зависимость коэффициента прохождения электрона от параметров квантово-механической задачи.

### **Задание 1. Подготовка к выполнению компьютерного эксперимента**

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.

2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задачам о частице, движущейся в области потенциального барьера.

3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

## ***Задание 2. Исследование зависимости коэффициента прозрачности барьера-ступеньки от потенциальной и полной энергии электрона***

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный прямоугольный барьер бесконечной ширины (рисунок 8), и задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 10) \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика, отображающего зависимость коэффициента прохождения электрона через барьера-ступеньку, от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите на шкале энергий системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(0 \div 20) \cdot 10^{-19}$  Дж.

2. Используя опцию «Трассировка», определите значение полной энергии электрона, соответствующее значению  $D = 0,5$ . Сохраните значения заданных параметров и результаты (график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки) в электронном документе Microsoft Word. Сохранение графической информации выполните посредством опций «Вставка \ Специальная вставка \ Точечный рисунок». Возможно также сохранение скриншота нажатием клавиши Print Screen.

3. Повторите действия, описанные в пп. 1 и 2, при трёх других значениях  $U_0$  из указанного выше диапазона.

4. Систематизируйте результаты и проанализируйте, как зависит от высоты барьера-ступеньки полная энергия электрона, при которой  $D = 0,5$ . Сформулируйте выводы.

## ***Задание 3. Исследование зависимости коэффициента прозрачности одномерного прямоугольного потенциального барьера от его параметров и полной энергии электрона***

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный прямоугольный барьер конечной ширины (рисунок 11) и задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, и значение ширины барьера – из интервала  $(2 \div 9) \cdot 10^{-9}$  м. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика, отображающего зависимость коэффициента прохождения электрона через барьер от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите

на шкале энергии системы координат ( $D, E$ ) границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(1 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, соблюдая условие  $E < U_0$ .

2. Используя опцию «Трассировка», определите значение полной энергии электрона, при котором  $D = 0,02$ . Сохраните значения заданных параметров и результаты (график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки) в электронном документе Microsoft Word.

3. Повторите действия, описанные в пп. 1 и 2, при трёх других значениях  $U_0$  из указанного в п. 1 диапазона.

4. Систематизируйте результаты и проанализируйте, как зависит от высоты барьера полная энергия электрона, при которой  $D = 0,02$ . Сформулируйте выводы.

5. Установите значение высоты потенциального барьера  $U_0$ , указанное преподавателем. Повторите действия, описанные в пп. 1 и 2, при трёх других значениях ширины барьера  $d$  из указанного в п. 1 диапазона.

6. Систематизируйте результаты и проанализируйте, как зависит от ширины барьера полная энергия электрона, при которой  $D = 0,02$ . Сформулируйте выводы.

7. Задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, и значение ширины барьера  $5 \cdot 10^{-9}$  м. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика зависимости  $D(E)$ . Установите на шкале энергии системы координат ( $D, E$ ) границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(2 \div 6) \cdot 10^{-19}$  Дж, соблюдая условие  $E > U_0$ .

8. Используя опцию «Трассировка», определите координаты  $i$ -го и  $k$ -го максимумов на кривой  $D(E)$ . Сохраните значения заданных параметров, график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

9. Повторите действия, описанные в пп. 7 и 8, при трёх других значениях высоты барьера  $U_0$  из указанного в п. 7 диапазона.

10. Определите значения длины волны де Броиля  
$$\lambda_b = \frac{h}{\sqrt{2m(E_\xi - U_0)}}$$
, соответствующие каждому из выделенных максимумов ( $\xi = i, k$ ). Систематизируйте результаты и проанализируйте, как зависит длина волны де Броиля от высоты потенциального барьера  $U_0$ . Сформулируйте выводы.

11. Задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика зависимости  $D(d)$ . Установите на оси абсцисс системы координат  $(D, d)$  границы диапазона варьирования ширины барьера  $(0 \div 8) \cdot 10^{-9}$  м. Установите на оси ординат в полях для аргументов следующие числовые значения полной энергии электрона:  $E_1 = 1,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_2 = 2,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_3 = 3,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_4 = 3,5 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_5 = 4,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_6 = 5,0 \cdot 10^{-19}$  Дж.

12. Используя опцию «Трассировка», определите значения ширины потенциального барьера, при которых  $D(E_1) = D(E_2) = 0,2$ . Сохраните значения параметров, графики зависимостей  $D(d)$  и результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

13. Используя опцию «Трассировка», определите значения ширины  $d$  потенциального барьера, соответствующие максимуму *одного и того же порядка* на кривых  $D(d)$ , рассчитанных при значениях полной энергии электрона  $E_3, E_4, E_5, E_6$ . Сохраните результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

14. Определите длины волн де Броиля, которые соответствуют максимумам, выделенным в п. 13, по формуле  $\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m(E_\xi - U_0)}}$ .

15. Сформулируйте выводы о полученных результатах.

#### ***Задание 4. Исследование вероятности прохождения электроном двухступенчатого потенциального барьера***

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный комбинированный ступенчатый потенциальный барьер и задайте значения: потенциальной энергии электрона  $U_0 = 9 \cdot 10^{-19}$  Дж, ширины барьера  $l = 2 \cdot 10^{-9}$  м, высоты барьера  $U_1$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 8) \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика, отображающего зависимость коэффициента прохождения электрона через барьер, от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите на шкале энергии системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(9,1 \div 13,0) \cdot 10^{-19}$  Дж. Используя опцию «Трассировка», определите значение коэффициента прозрачности барьера  $D$ , соответствующее

полной энергии электрона  $E = 1,0 \cdot 10^{-18}$  Дж. Сохраните в электронном документе Microsoft Word значения заданных параметров, график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки.

2. Повторите действия, описанные в п. 1, при трёх других значениях  $U_1$  из указанного в п. 1 диапазона.

3. Систематизируйте полученные результаты и проанализируйте, как коэффициент прозрачности зависит от величины  $U_1$ .

4. Исследуйте зависимость коэффициента прохождения  $D$  от ширины потенциального барьера высотой  $U_0$  при  $E = \text{const}$ . Проанализируйте полученные результаты и сформулируйте выводы.

5. Оформите отчет о работе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ахиезер, А. И. Атомная физика: справочное пособие / А. И. Ахиезер. – Киев : Наукова думка, 1988. – 268 с.
2. Балашов, В. В. Курс квантовой механики: учебное пособие / В. В. Балашов, В. К. Долинов. – М. : Ленанд, 2025. – 332 с.
3. Богацкая, А. В. Атомная физика : учебное пособие / А. В. Богацкая, А. М. Попов. – М. : Ай Пи Ар Медиа, 2023. – 687 с.
4. Бордовский, Г. А. Физика. Оптика, квантовая, атомная и ядерная физика : учебник для вузов / Г. А. Бордовский, Э. В. Бурсиан. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2025. – 299 с.
5. Годлевская, А. Н. Физика атома и атомных явлений : учебное пособие / А. Н. Годлевская, В. Г. Шолох ; под ред. А. А. Сокольского. – Гомель : ГГУ им. Ф. Скорины, 2017. – 307 с.
6. Горлач, В. В. Физика: квантовая физика. Лабораторный практикум : учебное пособие для вузов / В. В. Горлач. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2025. – 114 с.
7. Граков, В. Е. Атомная физика: лабораторный практикум для студентов физического факультета / В. Е. Граков, А. А. Сокольский, Г. Ф. Стельмах. – 2-е изд., перераб. и доп. – Минск : БГУ, 2012. – 231 с.
8. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : в 2 ч. Ч. 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. – М. : Юрайт, 2025. – 183 с.
9. Ефремов, Ю. С. Квантовая механика : учебник для вузов / Ю. С. Ефремов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2025. – 458 с.
10. Иванов, В. К. Физика. Введение в квантовую физику : учебное пособие для вузов / В. К. Иванов. – Санкт-Петербург : Лань, 2025. – 256 с.
11. Игошин, Ф. Ф. Лабораторный практикум по общей физике. Квантовая физика : учебное пособие / Ф. Ф. Игошин, Ю. А. Самарский, Ю. М. Ципенюк ; под ред. Ю. М. Ципенюка. – 3-е изд., испр. и доп. – М. : Физматкнига, 2012. – 461 с.
12. Иродов, И. Е. Квантовая физика. Основные законы : учебное пособие для вузов / И. Е. Иродов. – М. : Лаборатория знаний, 2025. – 356 с.
13. Кондиленко, И. И. Введение в атомную физику / И. И. Кондиленко, П. А. Коротков. – Киев: Вища школа, 1976. – 302 с.
14. Копытин, И. В. Квантовая механика : учебное пособие для вузов / И. В. Копытин. – М. : Юрайт, 2023. – 245 с.
15. Линднер, Г. Картины современной физики / Г. Линднер. – М. : Мир, 1977. – 272 с.

16. Матвеев, А. Н. Атомная физика : учебное пособие для студентов вузов / А. Н. Матвеев. – 2-е изд. — М. : ОНИКС, Мир и Образование, 2007. – 430 с.
17. Матышев, А. А. Атомная физика : учебное пособие для студентов высших учебных заведений / А. А. Матышев. – Санкт-Петербург : Изд-во СПбПУ, 2012. – 864 с.
18. Милантьев, В. П. Атомная физика : учебник и практикум для вузов / В. П. Милантьев. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2025. – 415 с.
19. Мултановский, В. В. Курс теоретической физики: квантовая механика : учебное пособие для вузов / В. В. Мултановский, А. С. Васильевский. – 2-е изд, перераб. – М. : Просвещение/Дрофа, 2007. – 400 с.
20. Попов, А. М. Атомная физика : учебное пособие / А. М. Попов, О. В. Тихонова. – М. : Книга по требованию, 2019. – Электрон. ресурс. – 363 с.
21. Практикум по атомной физике / под ред. Л. И. Киселевского. – Минск : Университетское, 1989. – 176 с.
22. Сивухин, Д. В. Общий курс физики : атомная и ядерная физика : в 5 т. Т. 5. Ч. 1 / Д. В. Сивухин ; под ред. Д. А. Миртовой. – М. : Физматлит, 2024. – 784 с.
23. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прокхоров ; редкол. : Д. М. Бонч-Бруевич [и др.]. – М. : Советская энциклопедия, 1984. – 944 с.
24. Шпольский, Э. В. Атомная физика : в 2 т. Т. 1. Введение в атомную физику/ Э. В. Шпольский. – 8-е изд., стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2010. – 557 с.
25. Яворский, Б. М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, А. К. Лебедев. – 8-е изд. – М. : Оникс, Мир и образование, 2006. – 1056 с.

Производственно-практическое издание

**Годлевская Анна Николаевна,  
Шолох Валентина Григорьевна,  
Шамына Антон Александрович**

**ФИЗИКА АТОМА  
И ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ:  
РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА  
И ИХ АНАЛИЗ В ПРОСТЕЙШИХ МОДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ**

Практическое пособие

Редактор Е. С. Балашова  
Корректор В. В. Калугина

Подписано в печать 01.12.2025. Формат 60x84 1/16.  
Бумага офсетная. Ризография.  
Усл. печ. л. 2,56. Уч.-изд. л. 2,80.  
Тираж 25 экз. Заказ 687.

Издатель и полиграфическое исполнение:  
учреждение образования  
«Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины».  
Специальное разрешение (лицензия) № 02330 / 450 от 18.12.2013 г.  
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,  
распространителя печатных изданий в качестве:  
издателя печатных изданий № 1/87 от 18.11.2013 г.;  
распространителя печатных изданий № 3/1452 от 17.04.2017 г.  
Ул. Советская, 104, 246028, Гомель.





