

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

БАКАЛАВРСЬКА РОБОТА

зі спеціальності 6.05080102 – «Фізична та біомедична електроніка»

на тему:

«Хвильові функції та енергетичний спектр частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі, що рухається з постійною швидкістю»

Котенко Дмитра Романовича

Завідувач кафедрою

_____ проф. О. Д. Погребняк

Науковий керівник

_____ проф. С. І. Денисов

Науковий керівник від кафедри

_____ доц. О. С. Кривець

«__» _____ 2019 р.

«__» _____ 2019 р.

Суми – 2019

РЕФЕРАТ

Мета роботи – визначення хвильових функцій та енергетичного спектру частинки у нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі, що рухається з постійною швидкістю.

Робота присвячена розширенню класу точно розв'язуваних задач квантової механіки. Її актуальність зумовлена як вивченням квантових властивостей конкретних систем, так і визначенням нових еталонних розв'язків для перевірки наближених квантово-механічних методів.

В даній бакалаврській роботі детально вивчені квантові властивості частинки в нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі, яка рухається з постійною швидкістю в певному напрямку. Шляхом вдалого представлення хвильової функції частинки в такому потенціалі нестационарне рівняння Шредінгера, яке описує квантові властивості частинки, зведено до звичайного диференціального рівняння другого порядку. Розв'язання цього рівняння з урахуванням граничних умов дозволило визначити хвильові функції частинки та її енергетичний спектр, який у випадку нерухомої ями збігається з відомим. Можна очікувати, що розглянута модель буде корисною для якісного аналізу спектра випромінювання атомів, що рухаються з великою швидкістю.

Робота викладена на 43-х сторінках, зокрема містить 6 рисунків та список цитованої літератури із 34-х джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НЕСТАЦІОНАРНЕ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА, НЕСКІНЧЕННО ГЛИБОКА ПОТЕНЦІАЛЬНА ЯМА, ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ, ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР, СТРУМ ЙМОВІРНОСТІ.

ЗМІСТ

ВСТУП	4
1. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ. СПІВВІДНОШЕННЯ ГЕЙЗЕНБЕРГА. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА.....	6
2. ТОЧНИЙ РОЗВ'ЯЗОК СТАЦІОНАРНОГО ТА ЗАЛЕЖНОГО ВІД ЧАСУ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА.	10
2.1 Частинка в нескінченно глибокій одномірній потенціальній ямі	10
2.2 Рух частинки назустріч прямокутній потенціальній ямі	13
3. ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ ТА ВЛАСНІ ФУНКЦІЇ ЧАСТИНКИ В ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ, ЩО РУХАЄТЬСЯ РІВНОМІРНО	16
3.1 Формулювання проблеми	16
3.2 Енергетичний спектр частинки в рухомій ямі	18
3.3 Власні функції частинки в рухомій ямі	24
3.4 Струм імовірності частинки	33
4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ТА ОХОРОНА ПРАЦІ	35
4.1 Вогнегасні речовини, та способи пожежогасіння	35
4.2 Розслідування професійних захворювань	38
ВИСНОВОК.....	40
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	41

ВСТУП

Квантова механіка вивчає закономірності мікросвіту і встановлює закони руху елементарних частинок, атомів, молекул та їх сукупностей. Наприклад, електрон може проявити інтерференцію, може проникати крізь потенційні бар'єри, а також зберігати ознаки звичайної частинки. Квантова механіка дозволяє зрозуміти будову більшості наноструктур, таких як квантові ями, нитки та точки [1-3]. Зазвичай під визначенням квантова яма розуміють – двовимірну структуру, тобто тонкий плоский шар напівпровідникового матеріалу, обмежений з двох боків іншим напівпровідником, всередині якого потенційна енергія електрона (дірки) нижче ніж за його межами, таким чином, рух електрона обмежений в одному вимірі.

Квантові ями є важливими структурами, оскільки вони доволі часто зустрічаються в нанoeлектронних приладах, через здатність частинок поблизу їх проявляти хвильові властивості. Таких як резонансні тунельні діоди [7,8] у складі високочастотних генераторів електричних коливань; лазери на квантових ямах, перевагою яких є можливість змінювати енергію локальних рівнів (валентної зони та зони провідності), а також частоту випромінювання, транзисторів із високою рухливістю електронів [4-6].

Властивості частинок, а саме їх енергетичний спектр, доволі сильно залежать від особливостей потенціальних ям, які були сформовані в наноструктурах. Розв'язано доволі велику кількість задач, в яких енергетичний спектр частинок можна визначити точно [9-11]. При цьому дуже мало відомо аналітичних результатів нестационарних квантових задач. Така ситуація є типовою, наприклад, при наявності змінного електричного поля, перші теоретичні результати були отримані досить давно [12,13]. Зокрема, для прямокутної потенціальної ями при певних умовах були точно визначені хвильова функція та середня швидкість зміни енергії частинки [14-17]. Точні

результати в цій області особливо важливі, оскільки використання тих чи інших наближень не завжди виправдано [18,19].

Що стосується проблеми визначення енергетичного спектру та власних функцій квантової частинки в одновірній нескінченно глибокій потенціальній ямі, що рухається з постійною швидкістю, то, наскільки нам відомо, вона взагалі не розглядалася. Вирішення цієї проблеми, яка є актуальною як з точки зору розширення класу точно розв'язуваних задач квантової механіки [33-34], так і з точки зору визначення залежності енергетичних рівнів частинки від швидкості ями, і є метою даної роботи.

1. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ. СПІВВІДНОШЕННЯ ГЕЙЗЕНБЕРГА. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА.

Для створення повної картини фізичного світу недостатньо розглядати фізичні об'єкти з точки зору лише класичної фізики. Саме тут на допомогу приходить квантова механіка.

Квантова механіка — це принципово новий розділ фізики, який описує явища та процеси, що відбуваються з об'єктами, де параметри цих об'єктів порівняні за величиною з постійною Планка. Постійна Планка, або її ще називають постійна Планка-Дірака, визначає енергетичну залежність електромагнітного випромінювання з його частотою. Вона є дуже малою величиною та чисельно дорівнює:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Саме тому квантова теорія є вірною схемою для опису мікроскопічних явищ. В квантовій механіці класичні спостережувані величини можуть бути замінені на оператори (більш детально про оператори можна дізнатися з [20-21]). Якщо два оператори не комутують, то неможливо одночасно виміряти ці величини.

Візьмемо дві величини координату та імпульс частинки. Якщо взяти прилад, який точно виміряє координату частинки, то її імпульс буде мати повну невизначеність. Саме про це нам каже принцип невизначеності Гейзенберга (1.1). Він є одним із фундаментальних тверджень квантової механіки [22].

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.1}$$

Тут мається на увазі, що точність одночасного визначення координати та імпульсу частинки пов'язані. Так само можна записати й для інших спряжених величин. Наприклад крім координати та імпульсу спряженими є: енергія та час, кількість частинок та фаза, момент імпульсу та кут повороту (1.2). Ці вирази можна трактувати так: чим більша тривалість вимірювання Δt , тим точніше можна визначити енергію частинки; чим більше кількість електронів на верхньому енергетичному рівні, тим менше невизначеність фази випромінювання (використовується наприклад для лазерних приладів).

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$$

$$\Delta N \Delta \varphi \geq \hbar/2 \quad (1.2)$$

$$\Delta L \Delta \beta \geq \hbar/2$$

тут E – енергія; t – час; N – кількість частинок; φ – фаза; L – момент імпульсу; β – кут повороту.

Важливим принципом для квантової механіки є гіпотеза, що будь-яка частинка може проявляти як хвильові так і характерні для частинки властивості. Ця гіпотеза отримала назву корпускулярно хвильовий дуалізм частинки.

Для опису хвильових властивостей частинки використовується хвильова функція або її ще називають псі-функція (1.3). Ця функція є комплексно-значною величиною та може бути визначена як добуток модуля функції ψ та фазового множника $e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$.

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} \quad (1.3)$$

тут \vec{p} – імпульс частинки, \vec{r} – вектор, що задає положення частинки у просторі.

Один з основних постулатів квантової механіки: «Стан будь-якої квантової фізичної системи (частинка, наприклад електрон чи сукупність частинок) повністю визначається хвильовою функцією $\psi(\vec{r}, t)$, яка залежить від динамічних змінних \vec{r} і часу t . Квадрат модуля хвильової функції $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ описує щільність імовірності $P(\vec{r}, t)$ розподілу значень динамічних змінних \vec{r} для довільного моменту часу t [22, с. 14, с. 18]». Цей постулат був виведений М. Борном, він може бути записаний як:

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (1.4)$$

Важливо відмітити, що в (1.4) квадрат модуля псі-функції дорівнює добутку самої псі-функції на комплексно спряжену до неї, тобто $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi \cdot \psi^*$.

Для опису зміни станів з часом в квантовій механіці використовується хвильове рівняння Шредінгера [23, 24] або просто хвильове рівняння (1.5). В конкретних випадках можуть бути розглянуті стаціонарне (те, що не залежить від часу) та не стаціонарне рівняння.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.5)$$

тут \hat{H} – оператор Гамільтона, або ще іноді називають оператор потенціальної енергії. Він може бути представлений у вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \quad (1.6)$$

тут ∇^2 - оператор Лапласа; $U(\vec{r})$ – потенціальна енергія.

Для рівняння Шредінгера, складно знайти точні розв'язки тому часто використовують різні наближення (приклад точного розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера є наведеним в наступному розділі) [25-27]. Такими наближеннями можуть бути:

- квазікласичне наближення, в ньому розв'язок рівняння (1.5) шукається у вигляді розкладу деяких функцій A та B у ряд за ступенями \hbar ;
- теорія збурень, її використовують за наявності в задачі дуже малого параметру, яким нехтують за умови, що задача при цьому буде розв'язана точно, після чого до розв'язку додаються поправки. Що є обумовлені малими величинами.
- варіаційні методи, один з яких називається методом Рітца, його принцип базується на тому, що обирається псі-функція, яка задовольняє граничним умовам, вона складається з одного або декількох параметрів, які будуть змінюватися, для досягнення результату з найменшою енергією.

2. ТОЧНИЙ РОЗВ'ЯЗОК СТАЦІОНАРНОГО ТА ЗАЛЕЖНОГО ВІД ЧАСУ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА.

2.1 Частинка в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі

Однією з найпростіших задач в квантовій механіці, що має точний розв'язок є знаходження енергетичного спектру та хвильових функцій для частинки, що знаходиться в потенціальній ямі з нескінченно глибокими стінками [9, 26]. Розглядатимемо одновимірний випадок. Будемо вважати, що $U(x)$ задається формулою:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a, \end{cases} \quad (2.1)$$

де $2a$ - ширина ями, див. Рис. 1.

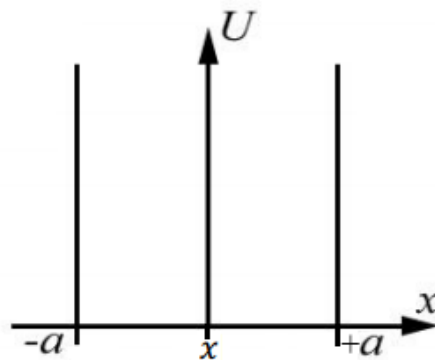


Рисунок 2.1. Схематичне позначення потенціальної ями з нескінченно високими стінками.

Перепишемо рівняння (1.5) у вигляді:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + U(x) \psi(x, t) \quad (2.2)$$

Для розв'язку цього рівняння будемо вважати, що:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar) \quad (2.3)$$

Підставивши (2.3) в (2.2) та провівши диференціювання отримаємо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + [E - U(x)]\psi(x) = 0 \quad (2.4)$$

Поза ямою потенціальна енергія нескінченно велика. При нескінченно високих стінках частинка не може проникнути крізь потенційний бар'єр, оскільки він не є прозорим. Однією з властивостей хвильової функції є її неперервність, тому на границях ями, вона також має дорівнювати нулю, тобто $\Psi_1(x)$ має задовольняти граничні умови:

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0 \quad (2.5)$$

Вираз (2.4) є диференціальним рівнянням другого роду. Введемо позначення $k^2 = 2mE/\hbar^2$ та перепишемо його в більш зручному вигляді:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0 \quad (2.67)$$

Його загальний розв'язок може бути отриманий використовуючи характеристичний метод:

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}. \quad (2.7)$$

Використовуючи (2.5) складаємо систему:

$$\begin{cases} \alpha e^{-ika} + \beta e^{ika} = 0, \\ \alpha e^{ika} + \beta e^{-ika} = 0. \end{cases} \quad (2.8)$$

Щоб система рівнянь (2.8) мала ненульовий розв'язок, її визначник, $\sin(2ka)$ має дорівнювати 0 :

$$k = \frac{\pi}{2a}n \quad (2.9)$$

тут $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Знаходження коефіцієнтів α та β у системі (2.8). Виходячи з визначення що ймовірність знаходження частинки в певному інтервалі простору визначається квадратом модуля хвильової функції та дорівнює одиниці, якщо відомо, що частинка існує в цьому просторі (умова нормування):

$$2a(|\alpha|^2 + |\beta|^2) + (\alpha\beta^* + \alpha^*\beta) \frac{\sin 2ka}{k} = 1 \quad (2.108)$$

Підставляючи (2.9) в перше рівняння системи (2.8), знаходимо $\beta = (-1)^{n+1}\alpha$. В свою чергу, підставивши останній вираз в (2.10), неважко переконатися, що $n \neq 0$ (при $n = 0$ умова нормування не виконується) і $|\alpha| = a^{-1/2}/2$.

Залишивши лише позитивні значення n , знаходимо непарні власні хвильові функції частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі [непарні хвильові функції, для яких $\Psi_{1n}(-x) = -\Psi_{1n}(x)$; парні хвильові функції, для яких $\Psi_{1n}(-x) = \Psi_{1n}(x)$].

n – непарне:

$$\Psi_{1n}(x) = a^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi nx}{2a}\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.11)$$

n – парне:

$$\Psi_{2n}(x) = a^{-1/2} \sin\left(\frac{\pi nx}{2a}\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.12)$$

Тепер згідно умови (2.9) та визначення k запишемо рівність, що дозволяє знайти власні значення енергії частинки в ямі (варто зауважити, що енергія частинки дискретна, тому $E = E_n$) при $n = 1, 2, \dots$:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4a^2} n^2$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \quad (2.13)$$

Згідно з (2.13) E_n є квадратичною функцією квантового числа n і основному стану частинки відповідає ненульова енергія E_1 .

2.2 Рух частинки назустріч прямокутній потенціальній ямі [34]

Задача полягає у знаходженні точного розв'язку одномірного, нестационарного рівняння Шредінгера. Даний приклад є на порядок складніший у порівнянні з тим, що був розглянутий в першій частині цього розділу.

Нехай частинка, рухається вздовж осі x до потенціального бар'єру (ями), який визначається як:

$$V(x) = -[\theta(x) - \theta(x - d)]U \quad (2.14)$$

Потенціал $V(x)$ розташований в області $0 < x < d$, де $d > 0$ – ширина ями. Варто зазначити, що $U > 0$ – глибина ями, а $U < 0$ – висота бар'єру. Для такої частинки рівняння Шредінгера буде мати вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad (2.15)$$

Хвильову функцію частинки в такому потенціалі можна зобразити як:

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0) \quad (2.16)$$

У виразі (2.16) $K(x, t; x', t_0)$ – виступає в ролі пропагатора, який знаходить амплітуду ймовірності переходу частинки зі стану 1 до стану 2, та визначається як уявна частина функції Гріна Він дозволяє отримати повну

картину з приводу типу руху частинки, а також дозволяє розв'язати відповідне рівняння Шредінгера. Його можна представити у вигляді:

$$K(x, t; x', t_0) = \theta(t - t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)\right] A(x, x'; E) dE \quad (2.17)$$

де $A(x, x'; E)$ – матриця спектральної густини, яка визначається різницею двох функцій Гріна $G^+(x, x'; E)$ та $G^-(x, x'; E)$, для даної системи. Використовуючи значення функції $G^+(x, x'; E)$ відносно положення частинки і бар'єру, а також умову, що функція Гріна зі знаком мінус $G^-(x, x'; E) = [G^+(x, x'; E)]^*$, можна записати точний розв'язок для пропагатора частинки, яка знаходиться в описаній системі:

$$K(x, t; x', t_0) = -\frac{\theta(t - t_0)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \text{Im} G^+(x, x'; E) \quad (2.18)$$

Використовуючи формули (2.16) та (2.18) запишемо:

$$\psi(x, t) = \psi_{>}(x, t) + \psi_{<}(x, t) \quad (2.19)$$

Тут $\psi_{>}(x, t)$ та $\psi_{<}(x, t)$ визначають рух хвильового пакету в різних напрямках. Враховуючи їх локалізацію, вони можуть бути визначні як:

$$\begin{aligned} \psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} t(E) \exp[ik(x - d)] \psi_{>}(E), \quad x > d \\ \psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} t^*(E) \exp[-ik(x - d)] \psi_{<}(E), \quad x > d \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\
&\times \frac{1}{\sqrt{v_{-u}(E)}} [t'(E)e^{ik_{-u}(x)} + r'(E)e^{-ik_{-u}(x)}] \psi_{>}(E), \quad 0 < x < d \\
\psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\
&\times \frac{1}{\sqrt{v_{-u}^*(E)}} [t'^*(E)e^{ik_{-u}^*(x)} + r'^*(E)e^{-ik_{-u}^*(x)}] \psi_{<}(E), \quad 0 < x < d \\
\psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\
&\times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} [e^{ik(x)} + r(E)e^{-ik(x)}] \psi_{>}(E), \quad x > d \\
\psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dE \exp\left[\frac{-i}{\hbar} E(t - t_0)\right] \times \\
&\times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} [e^{-ik(x)} + r^*(E)e^{ik(x)}] \psi_{<}(E), \quad x > d
\end{aligned}$$

Тут $\psi_{<}(E)$ та $\psi_{>}(E)$ є хвильовими функціями в енергетичному уявленні. Вони можуть бути визначені, використовуючи Фур'є перетворення. Для знаходження густини ймовірності положення частинки в просторі потрібно використовувати члені рівняння (2.19), які відповідають руху в протилежних напрямках та інтерференційними членами:

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi_{<}(x, t)|^2 + |\psi_{>}(x, t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \psi_{>}(x, t) \psi_{<}^*(x, t) \quad (2.20)$$

Отримані вирази можуть бути використані як для подальших досліджень що мають схожу тематику так і для чисельного розрахунку густини ймовірності в потенціалах типу (2.14) для різних областей простору.

3. ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ ТА ВЛАСНІ ФУНКЦІЇ ЧАСТИНКИ В ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ, ЩО РУХАЄТЬСЯ РІВНОМІРНО

3.1 Формулювання проблеми

Оскільки розв'язок класичної задачі з квантовою частинкою в нескінченно глибокій потенціальній ямі є добре відомим, то наступним кроком є додання нових параметрів, що будуть впливати на систему. Одним з таких параметрів, що може впливати на систему є швидкість. Проте тут одразу відбувається перехід від стаціонарної до нестаціонарної системи, тобто, тої що змінюється з часом. Схожі задачі можна зустріти, наприклад у [31]. Тут розглянуто розв'язок нестаціонарного рівняння Шредінгера для послідовності хвильових пакетів, які падають на прямокутний потенціальний бар'єр, який в свою чергу рухається з постійною швидкістю. Основним моментом у цій роботі є перевірка певної гіпотези яка стосується коефіцієнту відбиття на цьому бар'єрі. Або як приклад у [32] було розглянуто проблему з одновимірною потенціальною ямою, та частинкою, яка в ній знаходилась, до цього додається рух однієї зі стінок з постійною швидкістю. Тут було знайдено власні функції частинки в ямі, проте з використанням іншого методу.

На відміну від запропонованих прикладів, в даній роботі буде знайдено розв'язок нестаціонарного рівняння Шредінгера та визначено енергетичний спектр частинки що знаходиться в потенціальній ямі яка рухається з постійною швидкістю, її власні функції та струм імовірності.

В одновимірному випадку, коли потенціальна енергія частинки $V(x, t)$ залежить від координати x і часу t як $V(x, t) = U(x - vt)$, тобто коли потенціал зміщується вздовж осі x з постійною швидкістю $v = \text{const} \geq 0$, залежне від часу рівняння Шредінгера записується у вигляді:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x - vt) \psi \quad (3.19)$$

Тут \hbar – постійна Планка, $\psi = \psi(x, t)$ – хвильова функція частинки, m – її маса, i – уявна одиниця. На рисунку 3.1 показана потенціальна яма, яка рухається зі швидкістю v :

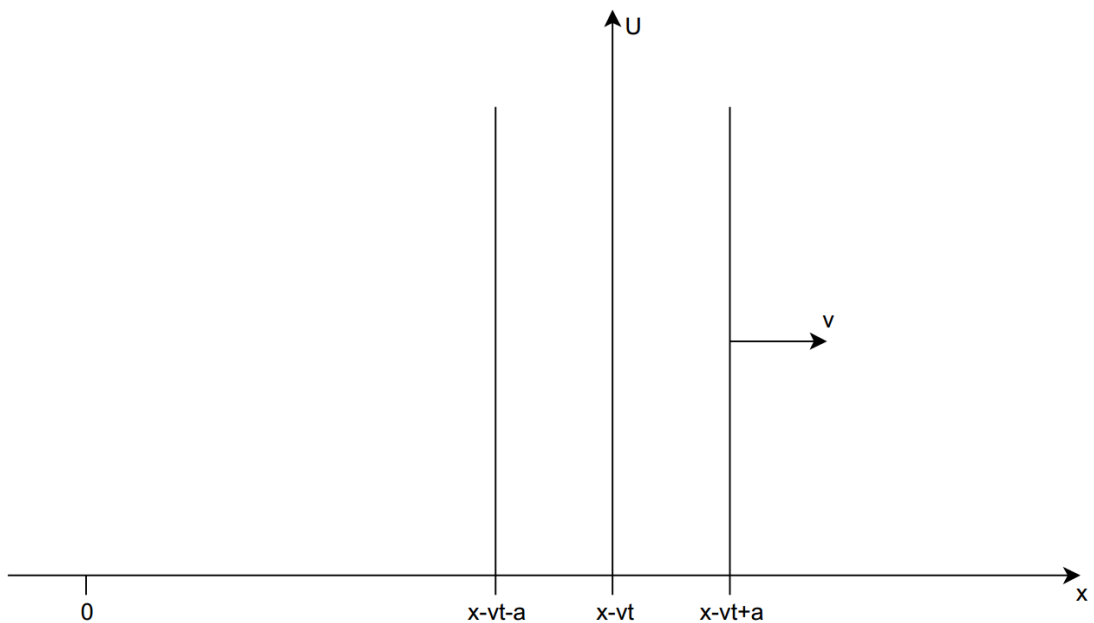


Рисунок 3.1. Схематичне зображення потенціальної ями шириною $2a$, що рухається з постійною швидкістю v вздовж осі x .

Оскільки частинка не може вийти за межі потенціальної ями, її хвильова функція має задовольняти умові нормування, тобто, ймовірність знаходження частинки в межах потенціальної ями дорівнює одиниці:

$$\int_{-a}^a |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (3.2)$$

Також хвильова функція має задовольняти граничним умовам:

$$\psi(-a) = 0 \quad \psi(a) = 0 \quad (3.310)$$

Використовуючи рівняння (3.1) і умови (3.2) і (3.3), спочатку знайдемо власні функції та енергетичний спектр частинки в рухомій ямі, тобто коли $v = \text{const}$.

3.2 Енергетичний спектр частинки в рухомій ямі

Для знаходження енергетичного спектру частинки у рухомій потенціальній ямі варто ввести деякі позначення:

$$\xi = x - vt \quad (3.411)$$

При цьому варто зазначити що розмірність нова змінна ξ має таку ж саму як і x , тому справедлива рівність:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.5)$$

Розв'язок рівняння (3.1) будемо шукати, припускаючи, що хвильову функцію може представити у вигляді двох множників (3.6). Тут експонента виступає у вигляді фазового множника:

$$\psi(x, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \quad (3.612)$$

Тут E – новий параметр, що має розмірність енергії, фізичний зміст якого буде розкрито пізніше. Підставимо вираз (3.6) в (3.1), враховуючи при цьому (3.4) та (3.5),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right] =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right] + U(\xi) \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right]$$

Розглянемо першу частину:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right] &= \left\{ \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial(x-vt)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} = -v \frac{\partial}{\partial \xi} \right\} = \\ &= i\hbar \left[-\frac{iE}{\hbar} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) - \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi'(\xi) \right] \end{aligned} \quad 13$$

Складаємо ліву та праву частини:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[-\frac{iE}{\hbar} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) - \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi'(\xi) \right] &= \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right] + U(\xi) \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\xi) \right] \end{aligned} \quad 14$$

Розділивши обидві частини рівності на мінус експоненту, а також враховуючи, що потенціал, за умовою задачі в межах ями дорівнює нулю, отримаємо рівняння:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(\xi) + E\psi(\xi) = i\hbar v \psi'(\xi) \quad (3.7)$$

Для зручності в подальших розв'язках проведемо заміну:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \chi = \frac{2mv}{\hbar} \quad (3.815)$$

Варто зазначити, що $v \geq 0$; $\chi \geq 0$. Таким чином рівняння (3.1) вдалося звести до звичайного диференціального рівняння другого роду:

$$\psi''(\xi) + k^2\psi(\xi) = i\chi\psi'(\xi) \quad (3.9)$$

Хвильова функція, що описує рух частинки може бути представлена у вигляді плоскої хвилі:

$$\psi(\xi) \sim \exp(i\lambda\xi) \quad (3.10)$$

Рівняння (3.9) прийнявши до уваги (3.10):

$$\exp(i\lambda\xi)'' + k^2 \exp(i\lambda\xi) = i\chi \exp(i\lambda\xi)'$$

В останній рівності провівши диференціювання та розділивши обидві частини на експоненту можна отримати:

$$\lambda^2 - \chi\lambda - k^2 = 0 \quad (3.11)$$

Подальший розв'язок зводиться до знаходження коренів звичайного квадратного рівняння:

$$\lambda = \frac{\chi}{2} \pm \sqrt{k^2 + \frac{1}{4}\chi^2} \quad (3.12)$$

Оскільки розв'язок квадратного рівняння представляє собою знаходження двох коренів, запишемо їх як:

$$\lambda = \lambda_+; \quad \lambda = -\lambda_- \quad (16.13)$$

Таким способом (3.12) вдається представити у більш зручному вигляді (3.14):

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{k^2 + \frac{1}{4}\chi^2} \pm \frac{\chi}{2} \quad (3.14)$$

Якщо порівнювати λ_+ та λ_- впливає важлива закономірність, що $\lambda_+ > \lambda_- > 0$.

Із (3.10), також враховуючи (3.13) випливає рівність, (3.15).

$$\psi(\xi) = A \exp(i\lambda_+\xi) + B \exp(-i\lambda_-\xi) \quad (17.15)$$

Саму хвильову функцію можна подати у вигляді добутку модуля псі-функції та фазового множника. Варто зазначити, що в (3.15) $|\xi| < a$.

Хвильова функція має ряд властивостей: однозначність, неперервність інтегрованість. Завдяки цим властивостям, вдається знайти граничні умові, які дозволяють знайти розв'язок поставленої задачі. Із назви випливає. Що на межі потенціальної ями, хвильова функція має дорівнювати нулю, тобто:

$$\psi(-a) = 0 \quad \psi(a) = 0 \quad (3.16)$$

Використовуючи умови (3.16) а також вираз (3.15), було отримано систему рівнянь (3.17):

$$\begin{cases} A \exp(i\lambda_+a) + B \exp(-i\lambda_-a) = 0 \\ A \exp(-i\lambda_+a) + B \exp(i\lambda_-a) = 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

Для існування ненульового розв'язку даної системи (3.17), може бути визначник, відносно коефіцієнтів A та B , прирівняний до нуля:

$$e^{i(\lambda_++\lambda_-)a} + e^{-i(\lambda_++\lambda_-)a} = 0 \quad (3.1818)$$

Розв'язок рівняння (3.18) може бути знайдений використовуючи формулу Ейлера, вона дозволила визначити суму двох експонент як функцію синуса:

$$\sin(\lambda_+ + \lambda_-) a = 0 \quad (3.1919)$$

У свою чергу підставляючи до (3.19) значення λ_+ та λ_- отримуємо:

$$\sin\left(2\sqrt{k^2 + \frac{1}{4}\chi^2}\right)a = 0 \quad (3.20)$$

Оскільки синус є періодичною функцією, і в певних точках ($0, \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$) дорівнює нулю, то можна стверджувати, згідно (3.20), що аргумент, який записано під синусом, буде визначатися як:

$$2a\sqrt{k^2 + \frac{1}{4}\chi^2} = \pi n \quad (3.21)$$

Тут n – натуральні числа, $n = 1, 2, \dots$

Якщо шукати розв'язок (3.21) відносно k^2 , то можна отримати наступний вираз:

$$k_n^2 = \left(\frac{\pi n}{2a}\right)^2 - \frac{1}{4}\chi^2 \quad (3.2220)$$

Варто зазначити, що коефіцієнт k^2 завжди буде більшим нуля $k_n^2 \geq 0$, оскільки всі константи є більшими за нуль. Повертаючись до виразу (3.8), а також враховуючи (3.22) можна знайти розв'язок, відносно невідомої величини, що має розмірність енергій E .

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 \quad (3.23)$$

Підставляючи до (3.23) вирази (3.8) та (3.22) можна знайти рівняння яке описує зміну енергетичного спектра частинки, що знаходиться в потенціальній ямі, яка рухається з постійною швидкістю:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4}\chi^2 = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{(2mv)^2}{\hbar^2}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2} - \frac{mv^2}{2} \quad (3.2421)$$

У (3.24) один з доданків є від'ємним. В першому доданку знаходяться лише константи за виключенням n . Згідно квантово-механічних уявлень енергетичний спектр частинки не може дорівнювати, або бути меншим за нуль. Отже для натурального ряду чисел $n = 1, 2, \dots$, впливає умова (3.25), яка забороняє існувати від'ємним значенням енергії частинки.

$$n \geq \frac{2mva}{\hbar\pi} \quad (3.2522)$$

Також можна ввести мінімальне значення параметра n :

$$n_{min} = \left[\frac{2mva}{\hbar\pi} \right] \quad (3.26)$$

Ввівши (3.26), варто позбавитися нульового значення енергії, який може існувати за відсутності швидкості, тому з правої частини (3.25) з'являються нові доданки:

$$n \geq n_{min} + 1 - \delta_{n,n_{min}} \quad (3.27)$$

Тут одиниця дозволяє позбавитися нульового енергетичного рівня; $\delta_{n,n_{min}}$ – символ Кронекера [28,29], вона визначається як:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Для подання у більш зручному варіанті, замінимо доданки в (3.24) на $E_n^{(0)}$ та E_{kin} :

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2}; \quad E_{kin} = \frac{mv^2}{2} \quad (3.2823)$$

Враховуючи (3.28) рівняння (3.24) трансформується на:

$$E_n = E_n^{(0)} - E_{kin} \quad (3.2924)$$

Отриманий вираз (3.29) виражає те, що за умови руху потенціальної ями, до енергетичного спектру додається кінетичне енергія зі знаком мінус. Використовуючи (3.27) а також (3.29), можна виразити деякі умови, за яких будуть існувати відповідні енергетичні рівні. Тобто:

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad \text{якщо } 0 < E_{kin} \leq E_1^{(0)};$$

$$n = 2, 3, 4, \dots, \quad \text{якщо } E_1^{(0)} < E_{kin} \leq E_2^{(0)};$$

$$n = 3, 4, 5, \dots, \quad \text{якщо } E_2^{(0)} < E_{kin} \leq E_3^{(0)};$$

$$n = l, l + 1, l + 2, \dots, \quad \text{якщо } E_{l-1}^{(0)} < E_{kin} \leq E_l^{(0)};$$

Такі викладки підводять до висновку, що за умови руху потенціальної ями, частинка може не мати енергетичного рівня, який відповідає значенню $n = 1$. Так само може бути й для наступних рівнів енергії. За відсутності швидкості, енергетичний спектр залишається стабільним.

3.3 Власні функції частинки в рухомій ямі

Повертаючись до системи (3.17), використаємо перше рівняння для заходження коефіцієнтів A та B .

$$B = -Ae^{i(\lambda_+ + \lambda_-)a} \quad (3.3025)$$

Підставляючи значення λ_+ та λ_- до (3.30), отримуємо:

$$B = -Ae^{2i\sqrt{k^2 + \frac{1}{4}\chi^2}a} \quad (3.31)$$

Під ступенем експоненти знаходиться відома величина, що була визначена у (3.21), враховуючи це:

$$B = -Ae^{in\pi} \quad (3.3226)$$

Скористаємося формулою Ейлера для більш зручного представлення (3.32). Вона дозволяє замінити експоненту на:

$$e^{in\pi} = (-1)^n$$

Таким чином отримано вираз, який пов'язує дві невідомі величини простою константою.

$$B = -(-1)^n A \quad (3.3327)$$

Підставляючи (3.33) до (3.15),

$$\psi_n(\xi) = A_n [e^{i\lambda_+\xi} - (-1)^n e^{-i\lambda_-\xi}] \quad (3.3428)$$

а також враховуючи значення λ_+ та λ_-

$$\begin{cases} \lambda_+ = \sqrt{k_n^2 + \frac{1}{4}\chi^2} + \frac{\chi}{2} = \frac{\pi n}{2a} + \frac{1}{2}\chi \\ \lambda_- = \sqrt{k_n^2 + \frac{1}{4}\chi^2} - \frac{\chi}{2} = \frac{\pi n}{2a} - \frac{1}{2}\chi \end{cases} \quad (3.3529)$$

Записано рівняння, яке визначає хвильову функцію частинки в ямі:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{i\frac{\chi}{2}\xi} \left[e^{i\frac{\pi n}{2a}\xi} - (-1)^n e^{-i\frac{\pi n}{2a}\xi} \right] \quad (3.3630)$$

Для перевірки коректності результату, було використано властивість псі-функції, а саме її неперервність. Тобто на границях ями, хвильова функція має

дорівнювати нулю. Саме це було підтверджено в (3.37), у вираз (3.36), замість ξ підставлено a , та отримано нульове значення.

$$\begin{aligned}
 \psi_n(a) &= A_n e^{i\frac{\chi a}{2}} \left[e^{i\frac{\pi n}{2}} - (-1)^n e^{-i\frac{\pi n}{2}} \right] = \\
 &= A_n e^{i\frac{\chi a}{2}} [(i)^n - (-1)^n (-i)^n] = \\
 &= A_n e^{i\frac{\chi a}{2}} (i)^n [1 - (-1)^n (-1)^n] = 0
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Для знаходження невідомого коефіцієнту A_n , користуємося, фундаментальною властивістю псі-функції. Квадрат модуля якої визначає ймовірність знаходження частинки в ямі. Якщо проінтегрувати за всією площею ями, а нам відомо, що часинка знаходиться в ямі зі 100 відсотковою ймовірністю, квадрат модуля хвильової функції, отримаємо одиницю.

$$1 = \int_{-a}^a |\psi_n|^2 d\xi \tag{31}$$

Знайдемо квадрат модуля псі-функції:

$$\begin{aligned}
 |\psi_n(\xi)|^2 &= |A_n|^2 \left[e^{i\frac{\pi n}{2a}\xi} - (-1)^n e^{-i\frac{\pi n}{2a}\xi} \right] \left[e^{-i\frac{\pi n}{2a}\xi} - (-1)^n e^{i\frac{\pi n}{2a}\xi} \right] = \\
 &= |A_n|^2 \left[1 - (-1)^n e^{i\frac{\pi n}{a}\xi} - (-1)^n e^{-i\frac{\pi n}{a}\xi} + 1 \right] = \\
 &= |A_n|^2 2 \left[1 - (-1)^n \cos \frac{\pi n}{a} \xi \right]
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

Після цього скористаємося умовою нормування:

$$1 = \int_{-a}^a |\psi_n|^2 d\xi = 2|A_n|^2 2 \int_0^a \left[1 - (-1)^n \cos \frac{\pi n}{a} \xi \right] d\xi = \tag{3.39}$$

$$= 4|A_n|^2 \left(a - (-1)^n \frac{a}{\pi n} \sin \left[\frac{\pi n}{a} \xi \right] \Big|_0^a \right) = 4a|A_n|^2$$

Із (3.39) можна знайти шуканий коефіцієнт:

$$A_n = \frac{1}{2\sqrt{a}} \quad (3.40)$$

Підставляючи його значення до (3.36), використовуючи формулу Ейлера, отримуємо функцію, що описує положення частинки, у межах потенціальної ями. З формули видно, що при різних значеннях n , функція змінює свою праву та ліву частину з косинуса на синус. Біля синуса з'явилась уявна одиниця, проте, вона особливої ролі не грає, оскільки хвильова функція не має фізичного змісту, а він належить лише квадрату модуля псі-функції. Тому ніяких протиріч не виникає.

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i\frac{\chi}{2}\xi} \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ i \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (3.41)$$

Для того, щоб оцінити вид отриманих хвильових функцій, було побудовано графіки, які показують, наскільки різняться псі-функції частинки в рухомій та нерухомій ямах. На рисунках (3.2-3.5) зображені хвильові функції в межах потенційної ями. Оскільки формула (3.41) включає в себе великий набір констант, які в свою чергу впливають на масштаб функції, їх фізичний зміст під час побудови було опущено. Використовуючи лише математичні міркування. Варто зазначити, що (3.41) є комплексно-значною функцією, тому для чисельного розрахунку було використано формулу Ейлера, для надання їй виду :

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{a}} \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \left[\cos\left(\frac{\chi}{2}\xi\right) + i \sin\left(\frac{\chi}{2}\xi\right) \right], & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \left[i \cos\left(\frac{\chi}{2}\xi\right) - \sin\left(\frac{\chi}{2}\xi\right) \right], & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

В таблицях (3.1-3.4) записано значення для хвильових функцій частинок в рухомій ямі $\psi_n(\xi)$ та в ямі яка не рухається $\psi_n(x)$, проте велику частину значень було вилучено, через громіздкість. Також варто звернути увагу, на те, що для побудови графіків було використано лише реальну частину комплексної псі-функції $\psi_{n,real}(\xi)$.

Таблиця 3.1 Значення хвильових функцій в залежності від координати при $n = 1$

x	ξ	$\psi_{n,real}(\xi)$	$\psi_n(x)$
-4	-4,5	0,04371	0
-3	-3,5	0,06178	0,19134
-2	-2,5	0,26805	0,35355
-1	-1,5	0,06413	0,46194
0	-0,5	-0,41147	0,5
1	0,5	-0,41147	0,46194
2	1,5	0,06413	0,35355
3	2,5	0,26805	0,19134
4	3,5	0,06178	0

Використовуючи дані в таблиці 3.1, побудовано графік:

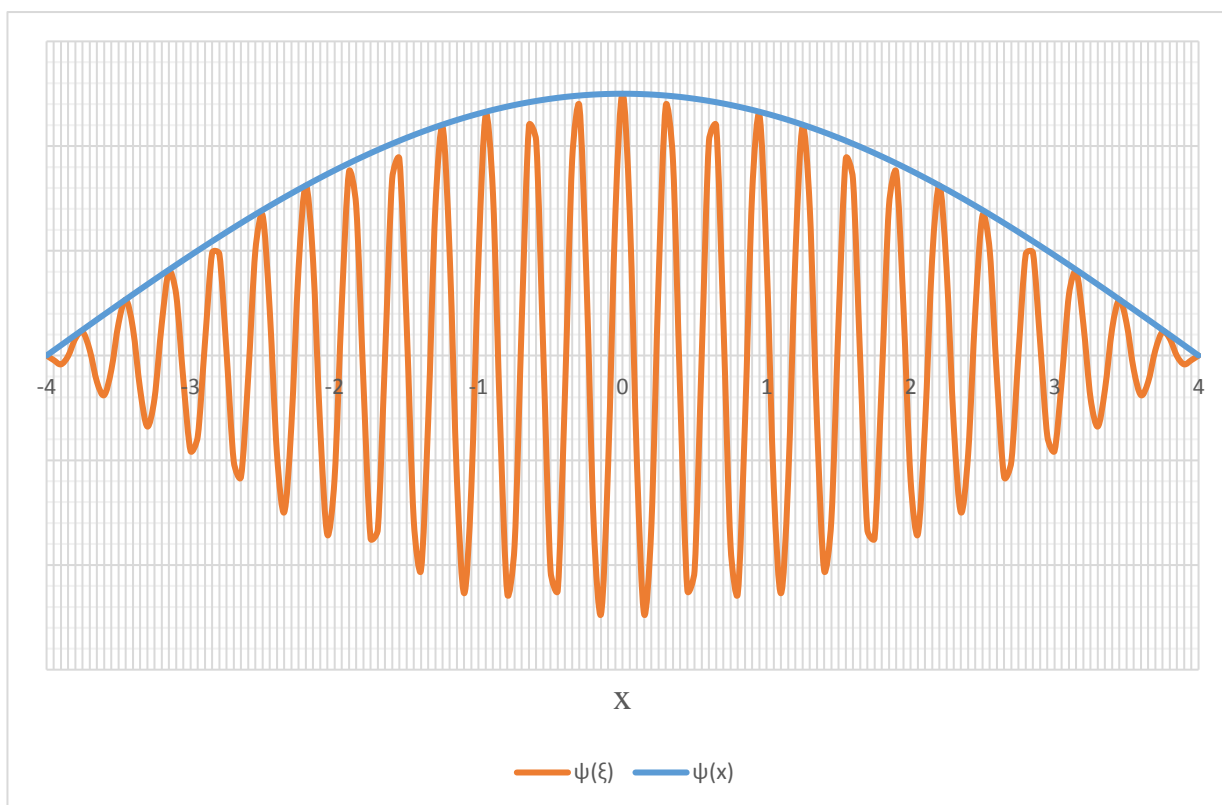


Рисунок 3.2 Залежність хвильових функцій від координати при $n = 1$

Таблиця 3.2 Значення хвильових функцій в залежності від координати при $n = 2$

x	ξ	$\Psi_{n,\text{real}}(\xi)$	$\Psi_n(x)$
-4	-4,5	0,17106	0
-3	-3,5	-0,14808	-0,35355
-2	-2,5	0,1212	-0,5
-1	-1,5	0,45641	-0,35355
0	-0,5	0,10409	0
1	0,5	0,10409	0,35355
2	1,5	0,45641	0,5
3	2,5	0,1212	0,35355
4	3,5	-0,14808	0

Використовуючи дані в таблиці 3.2, побудовано графік:

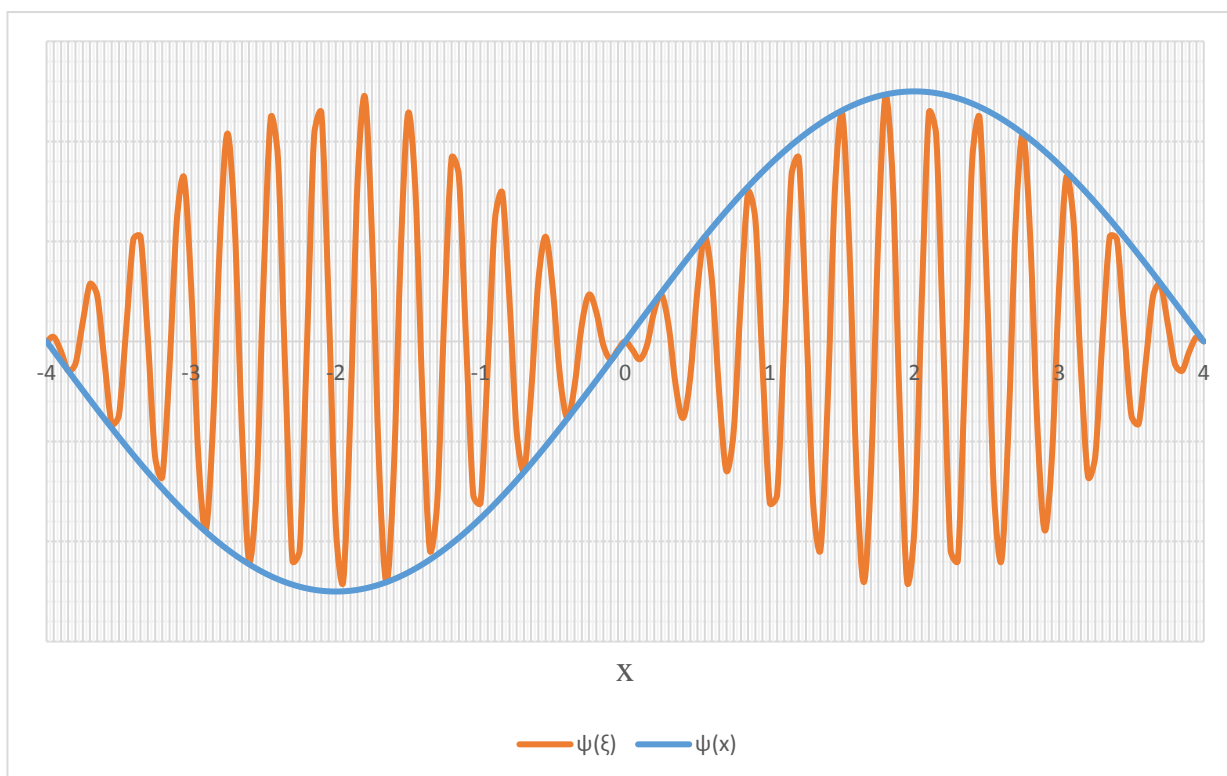


Рисунок 3.3 Залежність хвильових функцій від координати при $n = 2$

Таблиця 3.3 Значення хвильових функцій в залежності від координати при $n = 3$

x	ξ	$\psi_{n,real}(\xi)$	$\psi_n(x)$
-4	-4,5	0,04371	0
-3	-3,5	0,06178	-0,46194
-2	-2,5	0,26805	-0,35355
-1	-1,5	0,06413	0,19134
0	-0,5	-0,41147	0,5
1	0,5	-0,41147	0,19134
2	1,5	0,06413	-0,35355
3	2,5	0,26805	-0,46194
4	3,5	0,06178	0

Використовуючи дані в таблиці 3.3, побудовано графік:

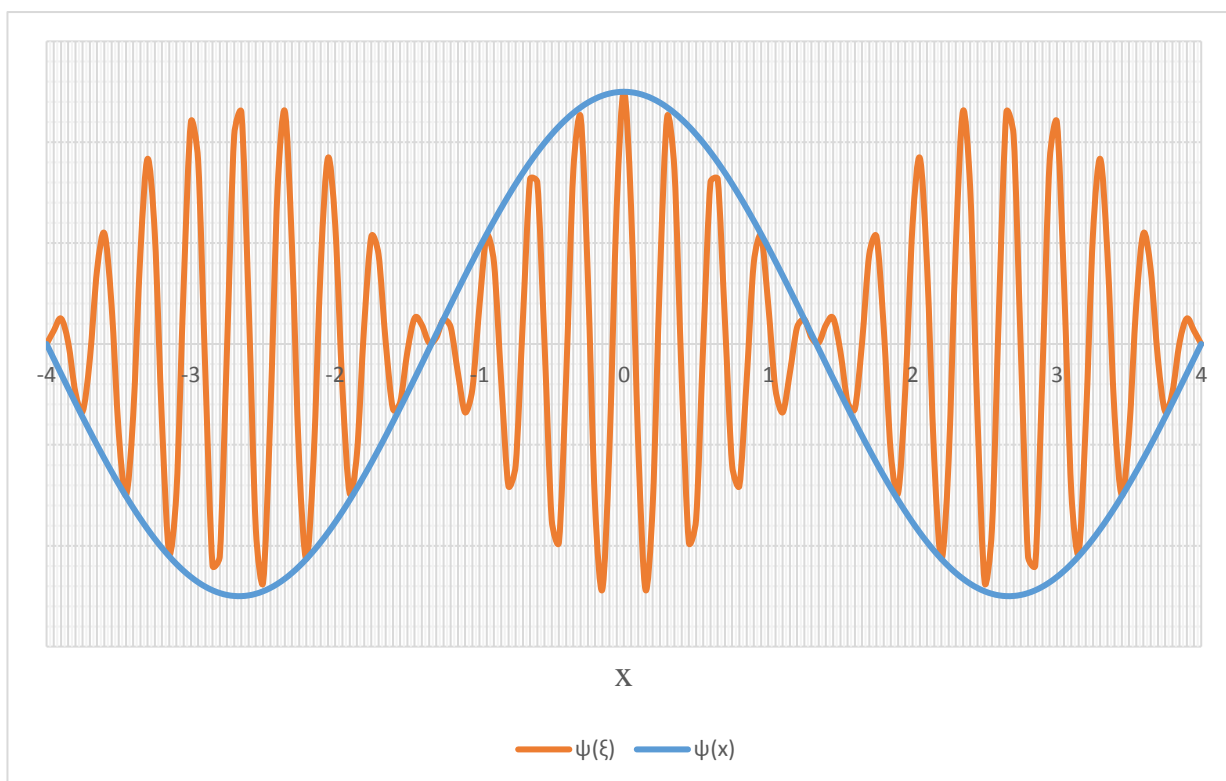


Рисунок 3.4 Залежність хвильових функцій від координати при $n = 3$

Таблиця 3.4 Значення хвильових функцій в залежності від координати при $n = 4$

x	ξ	$\psi_{n,real}(\xi)$	$\psi_n(x)$
-4	-4,5	-0,31608	0
-3	-3,5	0,27361	0,5
-2	-2,5	-0,09276	0
-1	-1,5	0,34932	-0,5
0	-0,5	0,19234	0
1	0,5	0,19234	0,5
2	1,5	0,34932	0
3	2,5	-0,09276	-0,5
4	3,5	0,27361	0

Використовуючи дані в таблиці 3.4, побудовано графік:

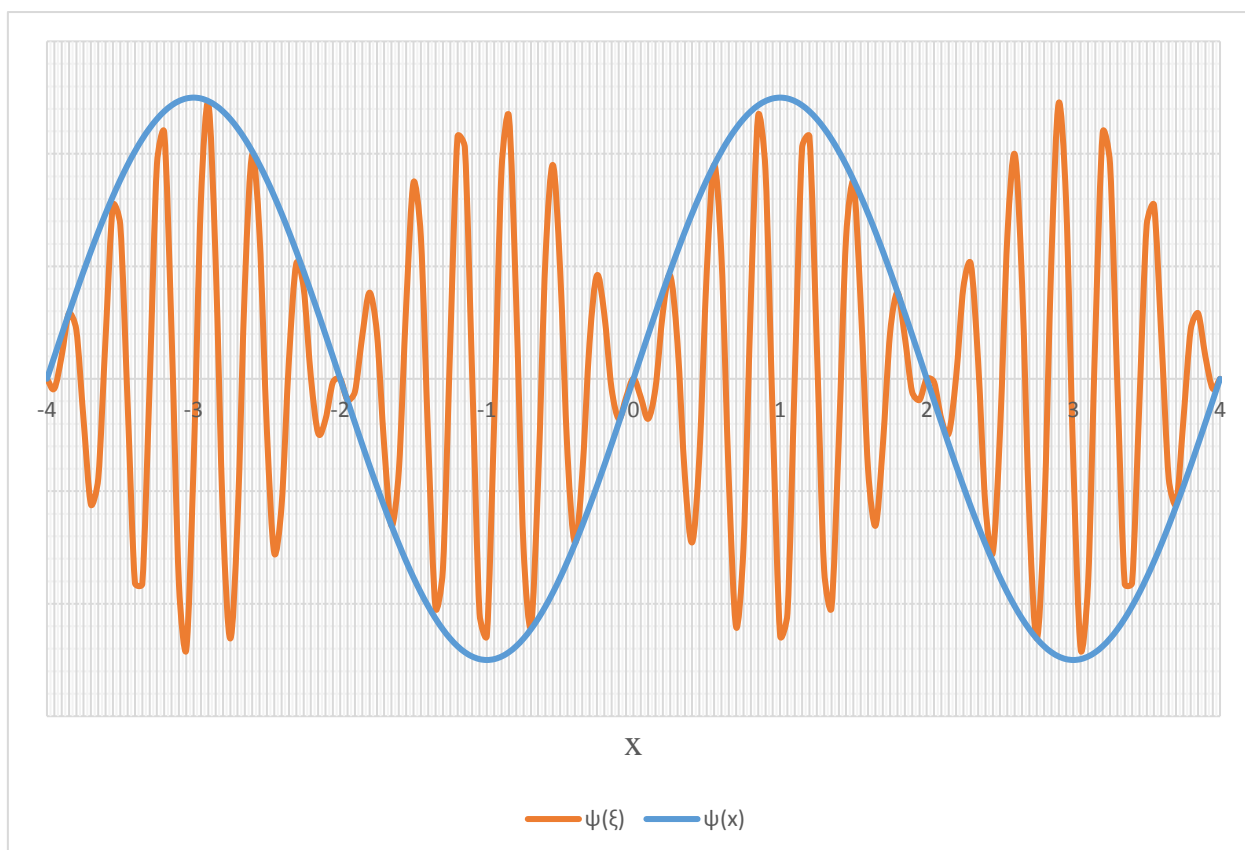


Рисунок 3.5 Залежність хвильових функцій від координати при $n = 4$

Аналізуючи отримані результати, можна напевно сказати, що хвильова функція частинки в межах потенціальної ями має схожий вигляд з класичним випадком, проте для кожного максимуму функції для частинки в нерухомій ямі припадає декілька максимумів та мінімумів функції для частинки в ямі, яка рухається рівномірно. Такий тип графіків дозволяє стверджувати, що існує висока ймовірність знайти частинку в місцях максимумів даних функцій. Тому для систему з рухомою потенціальною ямою існує великий розкид для місць з високою імовірністю знаходження частинки та імовірністю яка буде наближатися до нуля Це все впливає з принципу суперпозиції[30].

3.4 Струм імовірності частинки

Струмом імовірності в квантовій механіці називають швидкість зміни густини ймовірності знаходження частинки поблизу точки. Формула (3.42) є класичною формулою для знаходження струму ймовірності зі зміненими знаками, для більш зручних розрахунків.

$$j_n = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_n(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \psi_n^*(\xi) - \psi_n^*(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \psi_n(\xi) \right] \quad (3.42)$$

Відповідно до формули (3.42) підставляємо значення хвильової функції за умови непарних $n = 1, 3, 5, \dots$, проводимо диференціювання та знаходимо шуканий вираз:

$$\begin{aligned} j_n &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{a} \left[e^{i\frac{\chi}{2}\xi} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-i\frac{\chi}{2}\xi} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) - \right. \\ &\quad \left. - e^{-i\frac{\chi}{2}\xi} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \frac{\partial}{\partial \xi} e^{i\frac{\chi}{2}\xi} \cos\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{a} \left[-i\chi \cos^2\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \right] = \frac{\hbar\chi}{2ma} |\psi_n(\xi)|^2 = \frac{v}{a} |\psi_n(\xi)|^2 \end{aligned} \quad (3.43)$$

Так само й для парних значень $n = 2, 4, 6, \dots$ знаходимо:

$$\begin{aligned} j_n &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{a} \left[e^{i\frac{\chi}{2}\xi} (i) \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-i\frac{\chi}{2}\xi} (-i) \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) - \right. \\ &\quad \left. - e^{-i\frac{\chi}{2}\xi} (-i) \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \frac{\partial}{\partial \xi} e^{i\frac{\chi}{2}\xi} (i) \sin\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{a} \left[2 \left(-\frac{i\chi}{2} \right) \sin^2\left(\frac{\pi n}{2a}\xi\right) \right] = \frac{\hbar\chi}{2ma} |\psi_n(\xi)|^2 = \frac{v}{a} |\psi_n(\xi)|^2 \end{aligned} \quad (3.44)$$

Коректність отриманих результатів впливає з множника швидкості що стоїть перед косинусом або синусом. Струм імовірності не може існувати за відсутності швидкості, тому отриманий результат є правильним.

$$j_n(x, t) = \frac{v}{a} \begin{cases} \cos^2(\pi n \xi / 2a), & n = 1, 3, \dots \\ \sin^2(\pi n \xi / 2a), & n = 2, 4, \dots \end{cases} \quad (3.46)$$

В більш компактному вигляді розв'язок може бути записаний як:

$$j_n = \frac{v}{a} |\psi_n(\xi)|^2 \quad (3.4732)$$

Формула (3.47) дозволяє оцінити як буде змінюватися густина ймовірності частинки поблизу точки за умови руху потенціальної ями, а відповідно і самої частинки що в ній знаходиться.

4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ТА ОХОРОНА ПРАЦІ

4.1 Вогнегасні речовини, та способи пожежогасіння

Вогнегасні речовини. Для гасіння пожежі використовують такі засоби: розбавлення повітря негорючими газами до таких концентрацій кисню, що горіння припиняється; охолодження осередку горіння нижче температури горіння; механічний зрив полум'я струменем рідини або газу; зниження швидкості хімічної реакції, що протікає у полум'ї; створення умов вогнеперегородження, при яких полум'я поширюється через вузькі канали.

Вогнегасними називаються речовини, які при введенні в зону горіння припиняють його. Основними вогнегасними речовинами та матеріалами є: вода, водяна пара, хімічна та повітряно-механічна піни, водні розчини солі, негорючі гази, галогеновуглеводні вогнегасні сполуки та сухі вогнегасні порошки.

Вода - найпоширеніша речовина, вогнегасна здатність якої зумовлюється охолоджувальною дією, розбавленням горючого середовища парою, яка утворюється, та механічною дією на палаючу речовину (збивання полум'я), що поліпшує гасіння пожежі. Охолоджуюча дія води пояснюється великими значеннями її теплоємності та теплоти пароутворення. Вогнегасні властивості води підвищуються при використанні розчинів солей, соди, поташу. Поряд з цим існують деякі властивості води, які обмежують зону її застосування. Забороняється гасити водою: нафту та нафтопродукти; електроустановки, бо вода проводить електричний струм, наслідком чого може стати коротке замикання; лужні метали.

Хімічні і повітряно-механічні піни застосовуються для гасіння твердих та рідких речовин, які не взаємодіють з водою. Вогнегасні властивості піни визначають її за кратністю - відношенням об'єму піни до об'єму її рідкої фази, стійкістю, дисперсністю і в'язкістю. Повітряно-механічну піну одержують у

спеціальних піноутвірних апаратах із використанням піноутворювачів. Розрізняють повітряно-механічну піну низької (до 20), середньої (20-200) та високої (понад 200) кратності. Хімічна піна утворюється при взаємодії розчинів кислот і лугів у присутності піноутворювача. Вона складається з водяного розчину мінеральних солей, піноутворювача та бульбашок вуглекислого газу. Вартість хімічної піни вища, ніж повітряно-механічної, тому існує тенденція до скорочення використання хімічної піни при пожежогасінні. Під час гасіння пожеж піною покривають палаючі речовини, перешкоджаючи тим самим надходженню горючих газів і парів до осередку займання.

Застосування інертних і негорючих газів (аргон, азот, галогеновані вуглеводи та ін.) ґрунтується на розбавленні повітря та зниженні у ньому концентрації кисню до значень, які припиняють горіння. Так, вуглекислий газ використовується для гасіння палаючих складів ЛЗР, акумуляторних станцій, електрообладнання, печей тощо, але його не можна застосовувати для гасіння лужних і лужноземельних металів, тліючих матеріалів й деяких інших. Для гасіння цих матеріалів краще застосовувати аргон, а в деяких випадках і азот. Гарні вогнегасні властивості мають і галогеновані вуглеводи (хладони, бромистий етил тощо), бо високі значення густини зумовлюють можливість утворення вогнегасного струменя та проникнення крапель у полум'я, а також утримання вогнегасних парів біля осередку займання.

Порошкові вогнегасні засоби перешкоджають надходженню кисню до поверхні палаючого матеріалу. Їх використовують для гасіння різних горючих речовин та матеріалів невеликої кількості, якщо не можна застосовувати інші вогнегасні засоби. Прикладом таких матеріалів можуть служити хлориди калію і натрію, порошки на основі карбонатів та бікарбонатів натрію і калію. Вони призначені для створення на їх основі швидкодіючих автоматичних установок пожежогасіння, що застосовуються для захисту об'єктів, на яких

можливе виникнення пожеж класів А, В, С, та електроустановок під напругою до 20 кВ.

Засоби пожежогасіння поділяються на стаціонарні, пересувні й первинні.

- Стаціонарні пожежогасильні установки являють собою нерухомо змонтовані апарати, трубопроводи й устаткування, що призначені для подачі вогнегасних засобів до місць загоряння. До них, наприклад, відносяться спринклерні й дренчерні установки. Спринклерні установки призначені для автоматичної подачі води або повітряно-механічної піни при гасінні пожежі всередині будинку. Вони бувають водяними, і повітряними. Дренчерні установки відрізняються від спринклерних тим, що в дренчерних головках відсутні клапан і легкоплавкий замок. Дренчерні установки бувають ручного й автоматичного включення з клапаном групової дії. При автоматичному включенні одночасно подається сигнал тривоги.
- Пересувні пожежні машини поділяються на основні, що мають насоси для подачі води чи інших вогнегасильних речовин до місця пожежі, й спеціальні, що не мають насосів і призначені для різних робіт при гасінні пожежі. До основних пожежних машин відносяться пожежні автомобілі, автоцистерни, авто-насоси, мотопомпи, пожежні потяги, теплоходи, танки, літаки та ін. До спеціальних машин відносяться автомобілі служби зв'язку й освітлення, авто-драбини, самохідні лафетні стволи та ін.
- До первинних засобів пожежогасіння відносяться вогнегасники, гідропомпи (невеликі поршневі насоси), відра, бочки з водою, лопати, шухляди з піском, азбестові полотна, повстяні мати, повстини, ломы, пилки, сокири. Відповідно до використовуваної гасячої речовини вогнегасники поділяються на повітряно-пінні, хімічно-пінні, вуглекислотні, вуглекислотно-брометиллові, порошкові. Пінні вогнегасники мають дві ізольовані ємності, заповнені такими речовинами, що при змішуванні утворюють вогнегасну піну.

Час дії пінних вогнегасників 50...70 с, довжина струменя 6...8 м, кратність піни 5, стійкість 40 хв. Вуглекислий газ виходить у вигляді штучного снігу й відразу перетворюється в газ. Порошкові вогнегасники застосовують для гасіння горючих лужних металів. Викид порошкового заряду з балона вогнегасника виконується за допомогою стиснутого повітря, що автоматично подається із спеціально вбудованого балончика.

4.2 Розслідування професійних захворювань

Професійним вважають захворювання, викликане впливом на працівника шкідливих виробничих факторів, характерних для даної професії, і за діагнозом відповідне переліком професійних захворювань. До професійних захворювань відносяться: пневмоконіози (силікоз, викликаний впливом силікатного пилу, азбестоз - пил азбесту, талькоз - пил тальку), професійний бронхіт, вібраційна хвороба, катаракта, попереково-крижова радикулопатія, алергічні кон'юнктивіти та ін. Профзахворювання (як окремий випадок отруєння) підрозділяють на гострі (виникають при одноразовому протягом не більше однієї зміни впливі шкідливого виробничого фактора високого рівня на організм працівника) і хронічні (при тривалому впливі (місяці, роки) шкідливого виробничого фактора малих доз, рівнів).

Всі уперше виявлені хронічні захворювання і отруєння підлягають розслідуванню. Зв'язок профзахворювання з умовами роботи працівника визначається на підставі клінічних даних і санітарно-гігієнічної характеристики умов праці хворого, визначених санепідемстанцією. Така характеристика видається після запиту керівника лікувально-профілактичної установи, яка обслуговує дане підприємство. Для встановлення остаточного діагнозу і зв'язку профзахворювання з впливом виробничих чинників і трудового процесу фахівець з професійної патології направляє хворого до спеціалізованої лікувально-профілактичної установи відповідно до переліку МОЗ. Якщо встановлений факт профзахворювання, ця установа складає

повідомлення. Протягом 3 днів це повідомлення направляє підприємству, в санітарно-епідеміологічну станцію і лікувально-профілактичній установі, яка обслуговує це підприємство.

Власник підприємства зобов'язаний організувати розслідування причин кожного випадку профзахворювання протягом 7 днів після отримання повідомлення. Розслідування проводиться комісією, створеною наказом керівника санепідемстанції в складі:

- співробітника санепідемстанції (голова);
- представника профспілкової організації;
- представника трудового колективу;
- представника лікувально-профілактичної установи;
- фахівця з професійної патології;
- представника місцевого органу охорони здоров'я.

Комісія складає акт розслідування за спеціальною формою в кількості 5 екземплярів протягом 3 діб після закінчення розслідування. Акти направляють:

- хворому;
- підприємству, де виявлено профзахворювання;
- лікувально-профілактичній установі;
- профспілковій організації;
- один екземпляр залишається у санепідемстанції для аналізу і контролю.

Перший примірник акту зберігається на підприємстві 45 років. Роботодавець зобов'язаний протягом п'яти діб після закінчення розслідування розглянути матеріали та видати наказ про заходи щодо запобігання захворюванням та про притягнення до відповідальності осіб, з вини яких допущено порушення санітарних норм і правил.

ВИСНОВОК

В даній роботі розглянуто основні поняття з квантової механіки та принципи на яких вона базується, частинку що знаходиться в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками яка рухається рівномірно. Знайдено аналітично значення енергетичного спектру частинки, в такій ямі, формула (3.24). Отримане значення може бути трактоване так: «У квантовій механіці енергетичний спектр частинок відрізняється від класичної фізики; енергія частинки не може бути рівною нулю. Енергетичний спектр є дискретним, тобто частинка має свої енергетичні рівні. Додавання до такої системи нового параметру суттєво впливає на кінцевий результат у порівнянні з класичним випадком» Також знайдено власні функції частинки в ямі (3.41), та струм імовірності (3.46). Вони дозволяють побачити, на графіках що за умови існування нового параметру швидкості, розподіл ймовірності знаходження частинки в ямі змінюється в порівнянні з класичним випадком.

Дана модель є ідеалізованою, через нескінченну глибину ями, проте такий самий метод розрахунку, можна застосувати й для ями кінцевої глибини. Прикладом такої ями є атом, а частинка що в ній знаходиться – електрон. Оскільки така модель є типовою, її можна використати розраховуючи ймовірності тунелювання для частинок крізь потенціальні бар'єри.

Також важливим моментом є розширення класу точно розв'язуваних нестационарних задач з квантової механіки, що в свою чергу дозволяє точніше роздивитися фізичну картину існування всесвіту.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Демиховский В. Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В. Я. Демиховский, Г. А. Вугальтер. – Москва : Логос, 2000. – 248 с.
- [2] Булыгина Е. В., Макаручук В. В., Панфилов Ю. В. Оя Д. Р., Шахнов В. А. «Наноразмерные структуры: классификация, формирование и исследования», 2006, [3]
- [3] Шик А. Я., Бакуева Л. Г. Мусихин С. Ф., Рыков С. А. «Физика низкоразмерных систем», Санкт - Петербург 2001,[5-8, 16-17].
- [4] Nag B. R. Physics of Quantum Well Devices / B. R. Nag. – New York : Kluwer Academic Publishers, 2002. – 296 p.
- [5] Fu Y. Physical Models of Semiconductor Quantum Devices / Y. Fu. – Dordrecht : Springer, 2014. – 408 p.
- [6] Harrison P. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures / P. Harrison, A. Valavanis. – Chichester : Wiley, 2016. – 598 p.
- [7] Свірін П. В. Підходи до фізичного моделювання резонансно-тунельних діодів – Київ: Національний технічний університет України «КПІ», 2008. – 10с.
- [8] Глазачев А. В. Физические основы электроники / А. В. Глазачев, В. П. Петрович. – Томск: Томский политехнический университет, 2009. – 128с.
- [9] Flügge S. Practical Quantum Mechanics / S. Flügge. – Berlin : Springer-Verlag, 1999. – 641 p.
- [10] Галицкий В. М. Задачи по квантовой механике. Часть 1 / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. – Москва : Едиториал УРСС, 2001. – 301 с.
- [11] Manousakis E. Practical Quantum Mechanics: Modern Tools and Applications / E. Manousakis. – Oxford : Oxford University Press, 2016. – 332 p.

- [12] Wilhelm H. E. Wavefunction, energy spectrum and uncertainty relation for a particle contained between moving potential walls / H. E. Wilhelm // J. Phys. A: Math. Gen. – 1983. – V. 16. – P. 2149-2159.
- [13] Makowski A. J. Exactly solvable models with time-dependent boundary conditions / A. J. Makowski, S. T. Dembiński // Phys. Lett. A. – 1991. – V. 154. – P. 217-220.
- [14] Glasser M. L. Quantum infinite square well with an oscillating wall / M. L. Glasser, J. Mateo, J. Negro, L. M. Nieto // Chaos Solitons Fractals. – 2009. – V. 41. – P. 2067–2074.
- [15] Di Martino S. A quantum particle in a box with moving walls / S. Di Martino, F. Anzà, P. Facchi, A. Kossakowski, G. Marmo et al. // J. Phys. A: Math. Theor. – 2013. – V. 46. – P. 301-365.
- [16] Di Martino S. Quantum systems with time-dependent boundaries / S. Di Martino, P. Facchi // Int. J. Geom. Methods Mod. Phys. – 2015. V. 12. – P. 1560003.
- [17] Longhi S. Bound states of moving potential wells in discrete wave mechanics / S. Longhi // EPL. – 2017. – V. 120. – P. 20007.
- [18] Fojón O. The quantum square well with moving boundaries: A numerical analysis / O. Fojón, M. Gadella, L. P. Lara // Comput. Math. Appl. – 2010. – V. 59. – P. 964–976.
- [19] Ahumada-Centeno M. Comment to: “The quantum square well with moving boundaries: A numerical analysis” / M. Ahumada-Centeno, P. Amore, F. M. Fernandez // Submitted to arXiv in October 2018, arXiv:1810.11350.
- [20] Давидович Б. М. Математический анализ. Четырехгодичный курс / Б. М. Давидович, П. Е. Пушкарь, Ю. В. Чеканов // Москва: МЦНМО, 2008. – 165 с.
- [21] Гурьянова К. Н. Математический анализ. / К. Н. Гурьянова, У. А. Алексеева, В. В. Бояршинов // - Екатеринбург: ИУУ, 2014. – 332 с.
- [22] Юхновський І. Р. Основи квантової механіки. 2-ге видання / І. Р. Юхновський // – Київ: Либідь, 2002. – 385 с.

- [23] Griffiths D. J. Introduction to quantum mechanics / D. J. Griffiths // New Jersey: Prentice Hall, 1995. – 386 p.
- [24] Вакарчук І. О. Квантова механіка: підручник. Видання четверте / І. О. Вакарчук // Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2012. — 872 с.
- [25] Bethe H. A. Intermediate quantum mechanics / H. A. Bethe // New York: New York – Amsterdam, 1964. – 334 p.
- [26] Ландау Л. Д. Курс теоретической физики. Том III. Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва: Физматлит, 2004. – 800 с.
- [27] Багров В. Г. Переход от квантовой механики к классической / В. Г. Багров. — Соросовский образовательный журнал №6, 1999. — с.110-115
- [28] Pope C. Geometry and Group Theory / C. Pope // 2008. – 180 p.
- [29] Frankel T. The Geometry of Physics An Introduction. Second Edition / T. Frankel // San Diego: Cambridge University Press, 2004. – 683 p.
- [30] Белоусов Ю. М. Квантова механіка та наносистеми. Навчальний посібник / Ю. М. Белоусов // Москва: МФТИ, 2011. – 168 с.
- [31] Dimeo R. M. Wave packet scattering from time-varying potential barriers in one dimension / R. M. Dimeo // American Journal of Physics. – February 2014. – P.142-152
- [32] Doescher S. W. Infinite Square-Well Potential with a Moving Wall / S. W. Doescher, M. H. Rice // South Dakota: American Journal of Physics. – December 1969. – P.1246-1249
- [33] Flavin J. N. Moving boundary initial and boundary value problems for Schrödinger equations: Solution bounds and related results / J. N. Flavin // Galway: National University of Ireland. - American Journal of Mathematical Analysis and Applications. – June 2009. – P.552-563
- [34] Лось В. Ф. Точное решение одномерного, зависящего от времени уравнения Шредингера с прямоугольной потенциальной ямой (барьером) и его применения / В. Ф. Лось, Н. В. Лось // Теоретическая и математическая физика, том 177. – декабрь 2013. – с. 497-517