

## ПЪРВИ СЪПКИ В КВАНТОВАТА ФИЗИКА ЕЛЕМЕНТАРНО ИЗЛОЖЕНИЕ II. МОДЕЛНИ ПРИМЕРИ (ПОТЕНЦИАЛНИ ЯМИ)

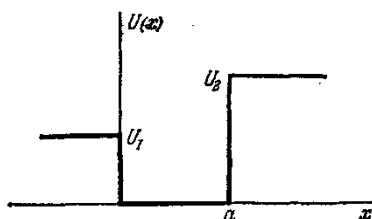
Михаил Аврамов, Димитър Мърваков  
Софийски университет „Св. Климент Охридски“

**Резюме.** Разгледани са и подробно анализирани случаи на частица в едномерна правоъгълна яма – безкрайно дълбока и с крайна дълбочина. Като пример е анализирана адсорбция на водороден атом върху метална повърхност чрез качествено и точно решение на задачата.

**Ключови думи:** квантова физика; правоъгълна яма; метална повърхност; адсорбция

### Въведение

Движението на частица в потенциално поле, формирано от участъци с постоянна потенциална енергия, дава възможност да се изучат трите характерни задачи – за свързани състояния (дискретен спектър), за разсейване (непреръснат спектър) и т.н. квазистационарни състояния. На прости примери ще разгледаме всяка от изброените задачи, като ще направим необходимите обобщения. Те могат да бъдат полезни при разглеждането на задачи с плавно променяща се потенциална енергия на частицата.



Фигура 1

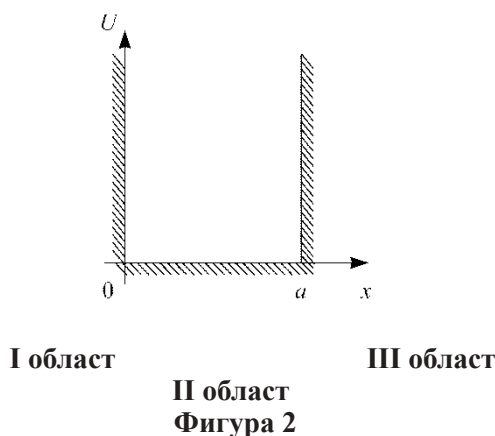
На фиг. 1 е показана потенциална яма от твърде общ вид. Както знаем от част I, вълновата функция на частицата има специфичен вид в зависимост от енергията на частицата (Avramov & Marvakov 2020, 85 – 96). Тя е осцилираща функция в класически разрешената област и експоненциално затихва в класически забранената област. По този начин вероятността частицата да се окаже извън ямата при  $0 < E < U_1$ , бързо клони към нула. Така тя се оказва локализирана основно в ямата. Такова състояние се нарича *свързано състояние*.

### Безкрайно дълбока правоъгълна потенциална яма

Като най-прост пример ще разгледаме т.нар. безкрайно дълбока правоъгълна потенциална яма [2,3,4]. Тя се получава от ямата на фиг. 1, когато  $U_1, U_2 \rightarrow \infty$ . Аналитично такава яма се описва с израза

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x > a. \end{cases}$$

а графично е показана на фиг. 2.



Както се вижда, дъното на ямата е избрано да съответства на енергия  $E = 0$ . Вълновата функция на частицата (само пространствената част, тъй като времевата част е еднаква и се определя от множителя  $\exp(-iEt/\hbar)$ ), е

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x), & x < 0, \\ \psi_{II}(x), & 0 < x < a, \\ \psi_{III}(x), & x > a, \end{cases}$$

като  $\psi_I(x) \equiv 0$ ,  $\psi_{III}(x) \equiv 0$ . В областта II вълновата функция представлява суперпозиция на две вълни на Дьо Бройл с импулс  $p = \sqrt{2mE}$ , разпространяващи се съответно по оста  $x$  и в противоположна на  $x$  посока, т. е.

$$\psi_{II}(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}.$$

Вълновата функция  $\psi(x)$  трябва да удовлетворява стандартните условия – за еднозначност, за ограниченост и за непрекъснатост, кои-

то са нарушени при  $x = 0$  и  $x = a$ . Удовлетворяването им се свежда до  $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ ,  $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$ , които са еквивалентни на

$$A + B = 0, \quad Ae^{ipa/\hbar} + Be^{-ipa/\hbar} = 0.$$

От първото условие следва  $B = -A$ , а второто се преписва във вида

$$2iA \sin \frac{pa}{\hbar} = 0.$$

Коефициентът  $A$  не може да бъде равен на нула, тъй като това би означавало  $\psi(x) \equiv 0$ , т.е. отсъствие на частица в ямата. Затова трябва  $\sin(pa/\hbar) = 0$ , което е изпълнено при

$$(1) \quad p_n = \frac{\pi \hbar}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Стойността  $n = 0$  е недопустима, тъй като води до  $\psi(x) \equiv 0$ . Тогава за енергията на частицата намираме

$$(2) \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Пространствената част на вълновата функция в разглежданата задача има вида

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, \\ 2iA_n \sin[(\pi n/a)x], \\ 0, \end{cases}$$

като коефициентът  $A$  се определя от условието за нормировка на вълновата функция

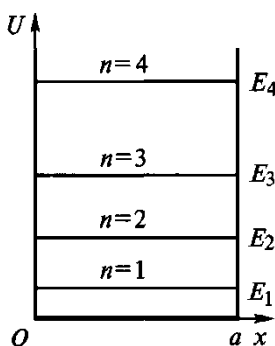
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^a 4|A_n|^2 \sin^2[(\pi n/a)x] dx = 2|A_n|^2 a = 1.$$

Следователно  $|A_n| = \sqrt{\frac{1}{2a}}$ , а фазовият множител остава неопределен. То-

гава можем да изберем  $A_n = e^{-i\pi/2} |A_n| = -i|A_n|$ , при което

$$(3) \quad \psi_n(x) = \begin{cases} 0, \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[(\pi n/a)x], \\ 0. \end{cases}$$

Важна особеност на намерените възможни стойности на енергията (2) на частицата, образуващи нейния енергетичен спектър, е неговата дискретност (фиг. 3). Енергията се определя от стойностите на цялото число  $n = 1, 2, 3, \dots$ , наречено квантово число, а процедурата за получаване на дискретния енергетичен спектър – квантуване.



Фигура 3

Ще отбележим, че в разгледаната задача квантуването възниква като резултат от налагането на условията за непрекъснатост на вълновата функция на границите на потенциалната яма. Съществува обща теорема за това, че енергията на частица винаги се квантува, когато частицата не може да се отдалечи в безкрайност (частицата извършва финитно движение), т.е. вероятността частицата да се окаже на безкрайност, е нула. По такъв начин възникването на квантуване в микросвета е свързано с наличието на вълнови свойства на частиците, когато те се намират в ограничена област от пространството. Когато частицата може да се отдалечи на безкрайност, т.е. движението ѝ е инфинитно, енергията на частицата не се квантува (Avramov & Marvakov 2020, 85 – 96).

На фиг. 3 схематично са показани няколко от най-ниско разположените енергетични нива (стойности на енергиите на частицата). Състоянието на частицата с вълнова функция  $\psi_1(x, t)$ , в което тя има най-ниската възможна енергия (в този случай  $n = 1$ ) се нарича основно състояние. Всички останали състояния с вълнови функции съответно  $\psi_2(x, t)$ ,  $\psi_3(x, t)$ ,  $\psi_4(x, t)$ , ... се наричат възбудени: стойността  $n = 2$  съответства на първото възбудено състояние, стойността  $n = 3$  – на второто възбудено състояние и т.н.

Най-ниското енергетично ниво е с енергия  $E_1 \neq 0$ . В класическия случай минималната енергия на частицата е равна на нула и тя се намира неподвижна на дъното на ямата. Такова състояние на покой в квантовия случай не съществува – частицата е в постоянно движение, проявявайки своите вълнови свойства.

Ще разгледаме по-подробно структурата на дискретния енергетичен спектър на частицата в ямата. Разликата  $\Delta E_n$  между енергията на  $(n+1)$ -то и енергията на  $n$ -то енергетично ниво е

$$(4) \quad \Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n+1) .$$

Както се вижда от получения резултат, разстоянието между две съседни нива нараства с увеличаване на квантовото число  $n$ . Да сравним възможните стойности на  $\Delta E_n$  за електрон ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg) в два конкретни случая. Когато свободен електрон се намира в яма с широчина  $a = 0,01$  m, напр. в парче метал,  $\Delta E_n \approx 3,7 \cdot 10^{-15} (2n+1)$  eV. В случай че широчината на ямата е  $a = 1 \cdot 10^{-10}$  m, напр. електрон в атом,  $\Delta E_n \approx 37(2n+1)$  eV. От друга страна, относителното разстояние между нивата е

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} .$$

При увеличаване на квантовото число  $n$  това отношение намалява и

$$(5) \quad \frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}$$

т.е. с нарастването на  $n$  дискретността на енергетичния спектър играе все по-малка роля. Този резултат е проява на важния физически принцип, наречен принцип на съответствието, според който при големи стойности на квантовото число  $n$ , т. е. при  $n \rightarrow \infty$ , квантовата механика преминава в класическата механика.

Ще разгледаме следния прост пример. Частица, намираща се в потенциална яма с непроницаеми стени, излъчва фотон, като преминава от ниво с номер  $(n+1)$  на ниво с номер  $n$ . Да се намери връзката между честотата на фотона и класическата честота на трептене на частицата с енергия  $E_n$ . При указания в условието преход се излъчва фотон с честота

$$(1^*) \quad \omega_{n+1,n} = \frac{\Delta E_n}{\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} (2n+1) , ,$$

където е използвана формула (4). Класическа частица трепти в ямата с честота

$$(2^*) \quad \omega = \frac{2\pi}{T}, \quad T = \frac{2a}{v} = 2a \sqrt{\frac{m}{2E_n}} .$$

Като заместим енергията с израза (2) намираме

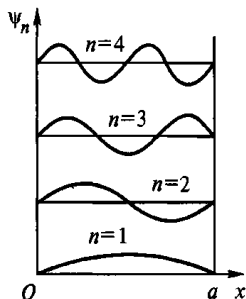
$$(3^*) \quad \omega = \frac{\pi^2 \hbar n}{ma^2} .$$

Нека да сравним  $\psi_{n+1,n}$  с  $\psi$ , като образуваме отношението им

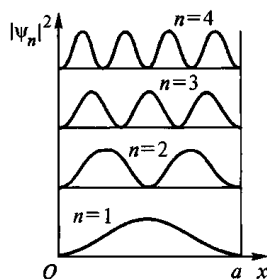
$$(4^*) \quad \frac{\omega_{n+1,n}}{\omega} = 1 + \frac{1}{2n} \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad n \rightarrow \infty.$$

Виждаме, че класическият случай се получава след граничен преход  $n \rightarrow \infty$  в квантовомеханичното решение на задачата.

Нека анализираме свойствата на вълновата функция (3) на частицата в безкрайно дълбоката правоъгълна потенциална яма. На фиг. 4 са показани графиките на функцията с различни стойности на  $n$  само в ямата, тъй като извън нея тя е нула.



Фигура 4



Фигура 5

Както се вижда, общото за вълновите функции е, че за всяка една от тях върху широчината на ямата се налагат цяло число полувълни на Дьо Бройл. Наистина, от условието за квантуване на импулса (1) и формулата на дьо Бройл  $p = h/\lambda$  имаме

$$p_n = \frac{\pi \hbar}{a} n = \frac{h}{\lambda}, \quad \rightarrow \quad \frac{\lambda}{2} n = a \quad \rightarrow \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

т.е. възникват стоящи вълни аналогично на трептене на струна със закрепени краища.

Вълновите функции с различни стойности на  $n$  се различават съществено една от друга. Тези с нечетни номера имат стойност, различна от нула в средата на ямата, докато функциите с четни номера имат стойност, равна на нула в тази точка. Това означава, че тези с нечетни номера спрямо средата на ямата са симетрични функции на координатата, а функциите с четни номера са асиметрични функции на координатата.

Съществува свойство на вълновите функции с определена енергия  $E_n$  на частицата, наричащо се осцилационна теорема, чиято същност се състои в следното. Вълновата функция, съответстваща на пореден номер  $n$ , се анулира в точките на интервала  $0 < x < a$  точно  $n-1$  пъти. Граничните точки не

влизат в тази съвкупност. На минималната енергия  $E_1$  съответства вълнова функция  $\psi_1(x)$ , която не се анулира нито веднъж в интервала  $0 < x < a$  (фиг. 4). Това свойство се наблюдава във всички случаи, когато енергетичният спектър на частицата е дискретен  $\{E_1, E_2, E_3, \dots\}$  и има всеобщ характер.

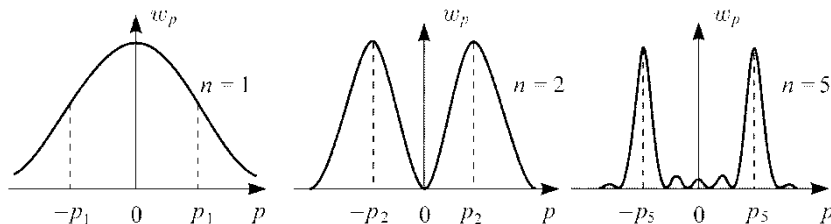
Ще намерим вероятността частицата да се намира в различни точки от ямата, тъй като извън ямата вероятността е нула. Като отчетем (3), имаме

$$dW_n = w_n(x)dx = |\psi_n(x)|^2 dx = 2 \sin^2 \left( \frac{\pi n x}{a} \right) \frac{dx}{a}.$$

На фиг. 5 е показано разпределението на плътността на вероятността, т. е.  $|\psi_n(x)|^2$  за първите четири стойности на  $n$ . Както се вижда, плътността на вероятността се оказва съществено различна за различните стойности на  $n$ . Така в основното състояние, т.е. при  $n = 1$ , частицата с най-голяма вероятност се намира в средата на ямата, а в първото възбудено състояние, т.е. при  $n = 2$ , вероятността частицата да се намира в средата на ямата, е равна на нула, но тя с равна вероятност може да се окаже или в лявата, или в дясната половина на ямата. Размерът на всяка област  $\Delta x$ , в която вероятността за присъствие на частицата е отлична от нула, зависи от квантовото число  $n$  и е равна на

$$(6) \quad \Delta x = \frac{a}{n}.$$

От друга страна, импулсът  $p$  на частицата няма определена стойност. За да получим разпределението на различните стойности на импулса на частицата в ямата, ще използваме принципа на суперпозицията (Karlov & Kirichenko 2004). Ще представим вълновата функция на частицата чрез функциите с определена стойност на импулса, т.е. чрез вълните на дьо Бройл, което означава разлагане на вълновата функция (3) в интеграл на Фурие. Резултатът от това пресмятане е показан графически на фиг. 6, където е представена плътността на вероятността  $w_p$  за различните стойности на импулса  $p$  в безкрайно



Фигура 6

дълбока правоъгълна потенциална яма при стойности на квантовото число  $n = 1$ ,  $n = 2$  и  $n = 5$ . Както се вижда от фигурата, разпределението съдържа

безкраен брой възможни импулси. За всички състояния, освен това с минимална енергия, плътността на вероятността има максимуми при  $p = -p_n$  и  $p = +p_n$ , като  $p_n = \pi \hbar n / a$ . За състоянието с минимална енергия  $n = 1$  стойността на  $p_1 = \pi \hbar / a$  определя широчината на единствения максимум. Като груба оценка на характерния интервал от възможни стойности на импулса на частицата можем да приемем

$$(7) \quad \Delta p = p_n - (-p_n) = 2p_n.$$

Тогава можем да запишем

$$\Delta x \Delta p = \frac{a}{n} \times \frac{2\pi \hbar n}{a} = h > \hbar.$$

Полученото съотношение

$$(8) \quad \Delta x \Delta p \sim \hbar$$

изразява количествено съотношението за неопределеност на Хайзенберг. То показва, че координатата и импулсът на частицата не могат да имат едновременно определени стойности. Освен това, ако ограничаваме по-силно областта на движение на частицата, т. е. намаляваме размерът  $\Delta x$  на областта на възможното ѝ местоположение, нараства неопределеността  $\Delta p$  на стойностите на импулса и обратно, ако увеличаваме размера  $\Delta x$  на областта на възможното местоположение на частицата, намалява неопределеността  $\Delta p$  на стойностите на импулса, като тяхното произведение трябва да бъде от порядъка на  $\hbar$ .

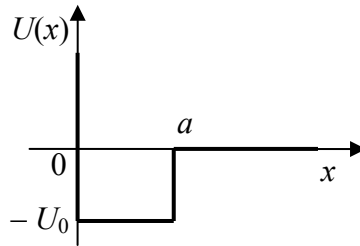
Изводите, които бяха направени при анализа на тази частна задача, за квантуване на енергията на частица в безкрайно дълбока правоъгълна потенциална яма и свойствата на вълновата функция са твърде общи по характер и приложими в случаи, когато потенциалната енергия на частицата има ямоподобен характер.

**Пример. Адсорбция на атомарен водород от метална повърхност (SZOKF. 2001)**

Процесът на адсорбция на атомарен водород от повърхността на метал може да бъде описан като захващане на водороден атом от потенциална яма  $U(x)$ , която се задава с изрази

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ -U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x \geq a \end{cases}$$

и графически има вида (вж. фиг. 7).



Фигура 7

Оста  $0x$  е перпендикулярна на повърхността на метала, която се намира при  $x = 0$ , а обемът му – при  $x < 0$ . Широчината на ямата е  $a = 8 \text{ \AA}$ .

Ще оценим дълбочината  $U_0$  на ямата, ако от експеримента се знае, че енергията на десорбция на водородния атом  $D = 0,086 \text{ meV}$ . Тя се определя като разлика между минималната енергия на атома, когато е свободен, и минималната му енергия, когато е прилепнал към повърхността на метала, т.е. е захванат от ямата.

Захващането на водородния атом от ямата е квантов ефект. Първоначално ще оценим енергията на водородния атом в ямата

$$E = \frac{p^2}{2M} - U_0,$$

вълна, както в случая на безкрайно дълбока правоъгълна потенциална яма. Тогава, като отчетем вълновите свойства на атома и приемем, че в ямата се формира стояща вълна, възможните стойности на импулса са

$$p_n = \frac{\pi \hbar n}{a}, \quad n = 1, 2, \dots, n_{\max}.$$

За минималната енергия на водородния атом в ямата ( $n = 1$ ) имаме

$$E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2} - U_0,$$

откъдето следва

$$D = 0 - E_{\min},$$

$$(9) \quad U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2} + D \approx 0,4 \text{ meV},$$

като е отчетено, че масата на водородния атом е  $M = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ .

Получената оценка е приближена, защото не отчита, че в областта  $x > a$  вълновата функция е различна от нула, като експоненциално затихва при отдалечаване от ямата. Сега ще направим точно решение на задачата с помощта на предложения в (Avramov & Marvakov 2020) метод. Атомът може да бъде локализиран в ямата, ако енергията му  $E$  удовлетворява условието  $-U_0 < E < 0$ . В този случай вълновата функция има вида

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x), & x < 0, \\ \psi_{II}(x), & 0 < x < a, \\ \psi_{III}(x), & x > a. \end{cases}$$

Функцията  $\psi_I(x) \equiv 0$ , тъй като при  $x < 0$  потенциалната енергия  $U(x) = +\infty$ . В областта  $0 < x < a$  импулсът е

$$(10) \quad p = \sqrt{2m(E - (-U_0))} = \sqrt{2m(U_0 - |E|)},$$

при което вълновата функция (с отчитане на принципа на суперпозицията) има вида

$$(11) \quad \psi_{II}(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}.$$

Тъй като за  $x > a$  и  $E > 0$  функцията  $\psi_{III}(x) = Ce^{ip'x/\hbar} + De^{-ip'x/\hbar}$  (според принципа на суперпозицията и  $p' = \sqrt{2mE}$ ), при преминаване към енергия от интервала  $-U_0 < E < 0$  имаме  $p' = i\sqrt{2m|E|} = iq$  и вълновата функция е

$$(12) \quad \psi_{III}(x) = Ce^{-qx/\hbar} + De^{qx/\hbar}.$$

Вълновата функция  $\psi(x)$  трябва да удовлетворява стандартните условия за еднозначност, ограниченост и непрекъснатост. Тъй като функцията  $\psi_{III}(x)$  при  $x \rightarrow \infty$  неограничено нараства, за да осигурим ограниченост на функцията, е достатъчно да положим коефициента  $D = 0$ . Непрекъснатостта и еднозначността на  $\psi(x)$  при  $x = 0$  изисква налагането на условието

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow 0 = A + B,$$

при което функцията  $\psi_{II}(x)$  може да се запише във вида

$$(13) \quad \psi_{II}(x) = A(e^{ipx/\hbar} - e^{-ipx/\hbar}) = 2iA \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) = A' \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right).$$

Условията за непрекъснатост на вълновите функции и техните производни при  $x = a$  водят до следната система уравнения:

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \rightarrow A' \sin\left(\frac{pa}{\hbar}\right) = Ce^{-qa/}$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \rightarrow pA' \cos\left(\frac{pa}{\hbar}\right) = -qCe^{-qa/}$$

Като разделим второто уравнение на първото, получаваме равенството

$$(14) \quad p \operatorname{ctg}(pa / \hbar) = -q ,$$

което е уравнение за определяне на енергетичния спектър на частицата в ямата при указани нейните параметри –  $a, U_0$ .

Уравнението (14) е трансцендентно и енергията  $E$  на частицата не може да бъде намерена в явен вид. Ще покажем, че енергетичният спектър на частицата е дискретен, т.е. енергията на частицата в ямата се квантува. За тази цел ще препишем (14) в нови променливи:

$$\xi = \frac{pa}{\hbar}, \quad \eta = \frac{qa}{\hbar} .$$

Тогава уравнението (14) придобива вида

$$(15) \quad \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \text{ като } \xi^2 + \eta^2 = \frac{2MU_0 a^2}{\hbar^2} = R^2 .$$

Тъй като  $\xi > 0, \eta > 0$ , съществен за анализа на решенията на (15) е първи квадрант на координатната система  $\xi, \eta$ . Функцията  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  има клонове в първи квадрант съответно в интервалите

$$\frac{\pi}{2} \leq \xi < \pi, \quad \frac{3\pi}{2} \leq \xi < 2\pi, \quad \frac{5\pi}{2} \leq \xi < 3\pi \text{ и т. н.}$$

Същевременно координатите  $\xi, \eta$  трябва да определят положението на точки, лежащи също в първи квадрант върху част от окръжността с радиус  $R$ . Пресечните точки на двете криви задават решението на (15), като с  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_N$  са означени стойностите на  $\xi$ -координатите на пресечните точки. Тогава може да запишем ( $1 \leq n \leq N$ )

$$\xi_n = \frac{p_n a}{\hbar} = \sqrt{\frac{2Ma^2}{\hbar^2} (U_0 - |E_n|)}, \quad |E_n| = -E_n ,$$

откъдето намираме възможните  $N$  на брой стойности на енергията на частицата

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2Ma^2} \xi_n^2 - U_0 .$$

Когато е изпълнено условието

$$R = \sqrt{\frac{2MU_0a^2}{\hbar^2}} < \frac{\pi}{2} \rightarrow U_0a^2 < \frac{\pi^2\hbar^2}{8M},$$

отсъства пресечна точка на графиките на окръжността с радиус  $R$  и функцията  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ . Това означава отсъствие на енергетично ниво на частицата, т.е. тя не може да бъде локализирана в ямата. Комбинацията от параметрите на ямата  $U_0a^2$  се нарича мощност на потенциалната яма. Ще отбележим, че частицата се намира в свързано състояние, когато мощността на ямата удовлетворява условието

$$U_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8M}.$$

Нека сега приложим общите положения към конкретната задача, която разглеждаме. Като отчетем, че  $D = -E_{\min} = -E_1$ , търсената величина

$$(16) \quad U_0 = \frac{\hbar^2}{2Ma^2} \hat{1}_1^2 + D.$$

Тъй като  $\frac{\pi}{2} < \xi_1 < \pi$ , ще въведем нова променлива  $z = \xi_1 - \frac{\pi}{2}$ , конкретната стойност на

$$\eta_1 = \sqrt{\frac{2MDa^2}{\hbar^2}} \approx 1,6285,$$

както и съотношението

$$\operatorname{ctg} \xi_1 = \operatorname{ctg} \left( \frac{\pi}{2} + z \right) = -\operatorname{tg} z,$$

при което уравнението (15) добива вида

$$\left( \frac{\pi}{2} + z \right) \operatorname{tg} z = 1,6285,$$

или

$$(17) \quad z = \operatorname{arctg} \frac{1,6285}{\frac{\pi}{2} + z}.$$

Намирането на  $z$  ще направим чрез числено решаване на уравнението (17) с точност до третия знак след десетичната запетая, като използваме следния алгоритъм. Тъй като търсената стойност на  $z$  е от интервала  $(0, \pi/2)$ , предполагаме че  $z_1 = \pi/4 \approx 0,7954$ . С тази стойност по формула (17) намираме

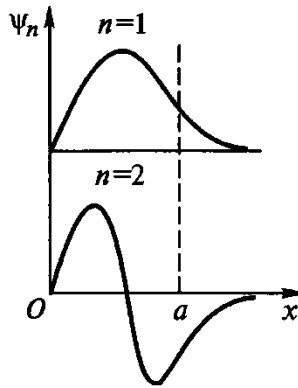
$$z_2 = \operatorname{arctg} \frac{1,6285}{\frac{\pi}{2} + z_1} \approx 0,6048$$

след това със  $z_2$  намираме  $z_3 \approx 0,6426$ . Като действаме по тази схема, последователно пресмятаме  $z_4 \approx 0,6343$ ,  $z_5 \approx 0,6361$ ,  $z_6 \approx 0,6357$ . Както се вижда от получените резултати, процедурата е сходяща и с точност до третия знак  $z_5 = z_6 \approx 0,636$ . Тази стойност ще приемем за решение на уравнението (17). Тогава имаме

$$\xi_1 = \frac{\pi}{2} + z \approx 2,207$$

и след заместване в (16) намираме търсената стойност на дълбочината на ямата  $U_0 = 0,24 \text{ meV}$ .

Както се вижда, получената стойност при точното решение е с 40% по-малка от грубата качествена оценка (9). Тази разлика се дължи на по-силната локализация на частицата (вълновата функция е различна от нула само в рамките на ямата) при



Фигура 8

използването на стоящи вълни в сравнение с точното решение, при което вълновата функция е различна от нула и извън ямата (фиг. 8), а това, от своя страна, означава по-слаба локализация.

**Симетрична правоъгълна потенциална яма с крайна дълбочина** (Karlov & Kirichenko 2004; Griffiths 1995; Martinson & Smirnov 2004).

Нека разгледаме поведението на частица в областта на симетрична правоъгълна потенциална яма с крайна дълбочина

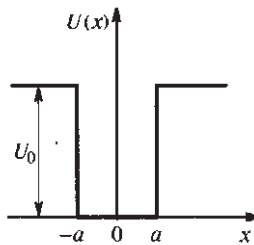
$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < -a \\ 0, & -a < x < a \\ U_0, & x > a \end{cases}$$

Като нулево ниво по енергията е избрано положението на дъното на потенциалната яма. Следва да се отбележи, че предложената моделна яма качествено описва движението на електрон в близост до атом и се прилага в атомната физика и физиката на твърдото тяло.

Съществуват два режима на движение на частицата в областта на ямата:

1.  $0 < E < U_0$ , при което частицата се намира в свързано състояние;
2.  $E > U_0$ , при което се наблюдава неограничено движение.

В първия случай (фиг. 9) вълновата функция включва три участъка:



Фигура 9

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x), & x < -a, \\ \psi_{II}(x), & -a < x < a, \\ \psi_{III}(x), & x > a. \end{cases}$$

Вътре в ямата (класически разрешената област) импулсът на частицата е  $p = \sqrt{2mE}$  и вълновата функция

$$(19) \quad \psi_{II}(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}.$$

Като използваме правилото за съответствие (част I, 14), можем да запишем

$$(20a) \quad \psi_I(x) = Ce^{\frac{1}{\hbar}q|x|} = Ce^{\frac{1}{\hbar}qx},$$

$$(20b) \quad \psi_{III}(x) = De^{-\frac{1}{\hbar}q|x|} = De^{-\frac{1}{\hbar}qx},$$

където параметърът  $q$  се дава с израза  $q = \sqrt{2m(U_0 - E)}$ .

Преди да наложим стандартните условия, ще отчетем свойствата на симетрия на вълновата функция. Както знаем от задачата за движение на частица в безкрайно дълбока потенциална яма, вълновата функция е симетрична спрямо средата на ямата, така както и потенциалната енергия. Тъй като ямата с крайна дълбочина притежава същите свойства, ще направим предварително разделяне на функциите на симетрични по отношение на средата на ямата и на асиметрични. Симетричните функции трябва да удовлетворяват условието

$$(21) \quad \psi(-x) = \psi(x),$$

което означава, че функцията е четна. Условието (21), приложено за функцията  $\psi_{II}(x)$ , дава

$$Ae^{-ipx/\hbar} + Be^{ipx/\hbar} = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar},$$

откъдето следва

$$(A - B)e^{-ipx/\hbar} + (B - A)e^{ipx/\hbar} = 2i(A - B)\sin(px/\hbar) = 0.$$

За да бъде изпълнено това условие за всяко  $x$ , е достатъчно  $A = B$ , при което функцията

$$\psi_{II}^s(x) = A(e^{ipx/\hbar} + e^{-ipx/\hbar}) = 2A\cos(px/\hbar) = A'\cos(px/\hbar).$$

Аналогично като използваме (20) при  $x > a$  имаме  $\psi_I(-x) = \psi_{III}(x)$ , т. е.

$$Ce^{-qx/\hbar} = De^{-qx/\hbar},$$

откъдето следва  $C = D$ . Следователно вълновата функция, симетрична спрямо средата на ямата, има вида

$$\psi_s(x) = \begin{cases} Ce^{qx/\hbar}, & x < -a, \\ A'\cos(px/\hbar), & -a < x < a, \\ Ce^{-qx/\hbar}, & x > a. \end{cases}$$

Аналогично асиметричните функции удовлетворяват условието

$$(22) \quad \psi(-x) = -\psi(x),$$

което означава че функцията е нечетна. Тогава намираме

$$B = -A, \quad D = -C.$$

Следователно вълновата функция, асиметрична спрямо средата на ямата, има вида

$$\psi_a(x) = \begin{cases} Ce^{qx/\hbar}, & x < -a, \\ A'\cos(px/\hbar), & -a < x < a, \\ -Ce^{-qx/\hbar}, & x > a. \end{cases}$$

На функциите трябва да бъдат наложени условия за непрекъснатост и гладък преход в точките  $x = \pm a$ . Тъй като възможните вълнови функции са или четни, или нечетни, достатъчно е да наложим условията само при  $x = a$ . Така за симетричната функция имаме

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II}}^s(a) &= \psi_{\text{III}}^s(a) \rightarrow A' \cos(pa/\hbar) = Ce^{-qa/}, \\ \psi_{\text{II}}^{s'}(a) &= \psi_{\text{III}}^{s'}(a) \rightarrow -pA' \sin(pa/\hbar) = -qCe^{-qa/}.\end{aligned}$$

Константите  $A'$  и  $C$  трябва да са различни от нула, което е възможно само ако

$$(23) \quad p \operatorname{tg}(pa/\hbar) = q.$$

Същата процедура, приложена за антисиметричната функция, дава

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II}}^a(a) &= \psi_{\text{III}}^a(a) \rightarrow A' \sin(pa/\hbar) = Ce^{-qa/}, \\ \psi_{\text{II}}^{a'}(a) &= \psi_{\text{III}}^{a'}(a) \rightarrow pA' \cos(pa/\hbar) = -qCe^{-qa/},\end{aligned}$$

(24)

Условията (23) и (24) не могат да бъдат удовлетворени едновременно, защото, ако това е възможно, би се получило  $p^2 = -q^2$ , или  $U_0 = 0$ , което противоречи на условието на задачата. Техните решения определят възможните стойности на енергията на частицата. Те могат да бъдат намерени чрез графично или числено решение на (23) и (24). За да направим графичното решение, ще въведем безразмерните величини

$$\xi = \frac{pa}{\hbar}, \quad \eta = \frac{qa}{\hbar}$$

Тогава решенията на уравнението

$$(25) \quad \eta = \xi \operatorname{tg} \xi,$$

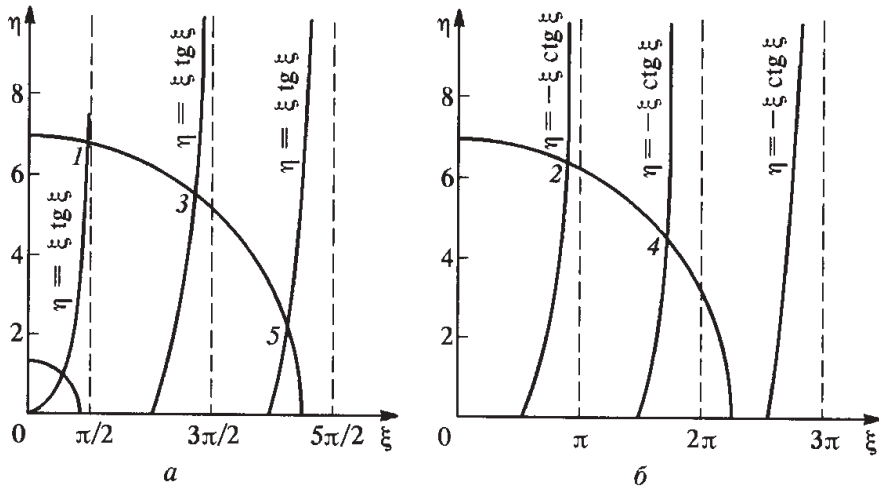
съответстват на симетрична вълнова функция, а решенията на уравнението

$$(26) \quad \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$$

на асиметрична вълнова функция, при което е изпълнено

$$(27) \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = R^2.$$

На фиг. 10а са показани графиките на функцията  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$  и окръжността (27) при  $\xi > 0$ ,  $\eta > 0$ , а на фиг. 10б – графиките на функцията  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  и окръжността (27) при същите условия. Координатите на пресечните точки на окръжността (27), съответно с кривите (25) и (26), дават възможните стойности на  $\xi$  и  $\eta$ . Като отчетем, че



Фигура 10

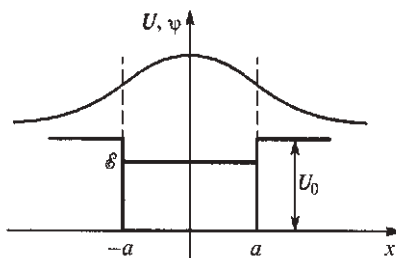
енергията  $E = p^2 / 2m$  и безразмерния параметър  $\xi = pa / \hbar$ , намираме

$$(28) \quad E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \xi^2 = U_0 - \frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta^2.$$

Броят на енергетичните нива в ямата е винаги краен и се определя от дълбочината  $U_0$  и широчината  $2a$  на потенциалната яма. Например, ако радиусът на окръжността (27) е  $R = 7$ , се получават пет на брой нива. На точките на пресичане 1, 3, 5 съответстват симетрични, а на точките 2, 4 – асиметрични вълнови функции. Ако  $R < \pi/2$ , т. е.

$$U_0 a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m},$$

съществува само една пресечна точка, на която съответства симетрична вълнова функция. В този случай в ямата има само едно ниво. Намаляването на стойността на  $U_0$  (при дадена стойност на  $a$ ) или на  $a$  (при фиксирано  $U_0$ ) води до ситуация, при която в ямата винаги остава само едно ниво. Такава яма се нарича плитка яма. При по-нататъшно намаляване на  $U_0$  (или на  $a$ ) енергията на частицата нараства (вж. формула (28)) и се приближава към  $U_0$ , но не надминава тази стойност (фиг. 11).

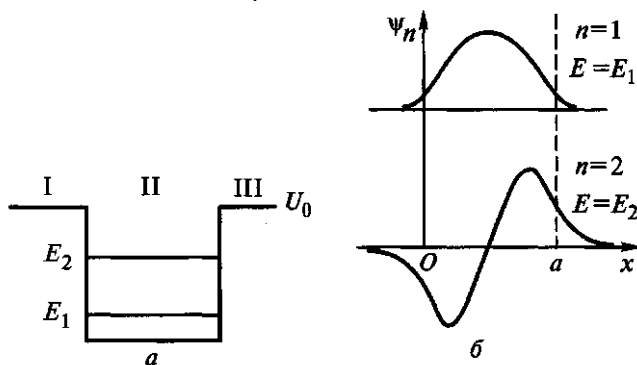


Фигура 11

В случая, когато  $U_0 \rightarrow \infty$ , стойностите на  $\xi_n \rightarrow n\pi/2$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Ямата преминава в безкрайно дълбока, като

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \xi_n^2 \rightarrow E_n^\infty = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} n^2$$

в пълно съответствие с формула (2). Следва да се отбележи, че енергетичните нива в потенциална яма с крайна дълбочина са разположени по-ниско спрямо дъното на ямата от съответните нива в безкрайно дълбока потенциална яма, т.е.  $E_n < E_n^\infty$ . На фиг. 12 са показани първите две енергетични нива ( $a$ ) и съответните две вълнови функции ( $b$ ) на частица в яма с крайна дълбочина.



Фигура 12

Както се вижда от фиг. 12, по-ниското положение на нивата се дължи на по-слабата локализация на частицата в ямата с крайна дълбочина, отколкото в безкрайно дълбоката яма.

Да анализираме поведението на частицата при енергии  $E > U_0$ . В този случай с отчитане на принципа на суперпозицията клоновете на функцията  $\psi(x)$  в трите области съответно са

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{ip'x/\hbar} + Be^{-ip'x/\hbar} \text{ при } p' = \sqrt{2m(E - U_0)} \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{ipx/\hbar} + De^{-ipx/\hbar} \text{ при } p = \sqrt{2mE}, \\ \psi_{III}(x) &= Fe^{ip'x/\hbar} + Ge^{-ip'x/\hbar} \text{ при } p' = \sqrt{2m(E - U_0)}.\end{aligned}$$

Физически те могат да бъдат интерпретирани по следния начин. Нека приемем, че на минус безкрайност има източник, който изстрелва частици. Всяка една се движи в посоката на оста  $x$ , съответстващата ѝ вълна достига до предната част на ямата при  $x = -a$ , частично се отразява, частично преминава. Преминалата вълна достига до  $x = a$ , частично се отразява, частично преминава, като се разпространява до безкрайност. Формира се стационарна ситуация. Тъй като при тази постановка на задачата в област III има само преминала вълна, ще положим  $G = 0$ .

Вълновата функция трябва да удовлетворява стандартните условия. Тя е ограничена навсякъде, но не е осигурена непрекъснатостта и гладкия преход при преминаване през точките  $x = \pm a$ . За тази цел налагаме следните условия:

$$(29a) \quad \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \rightarrow Ae^{-ip'a/\hbar} + Be^{ip'a/\hbar} = Ce^{-ipa/\hbar} + De^{ipa/\hbar},$$

$$(29б) \quad \psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a) \rightarrow p'(Ae^{-ip'a/\hbar} - Be^{ip'a/\hbar}) = p(Ce^{-ipa/\hbar} - De^{ipa/\hbar}),$$

$$(29в) \quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \rightarrow Ce^{ipa/\hbar} + De^{-ipa/\hbar} = Fe^{ip'a/\hbar},$$

$$(29г) \quad \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \rightarrow p(Ce^{ipa/\hbar} - De^{-ipa/\hbar}) = p'Fe^{ip'a/\hbar}.$$

От съотношения (29a) и (29б) можем да определим коефициентите  $C$  и  $D$  чрез  $A$  и  $B$ .

$$(30a) \quad Ce^{-ipa/\hbar} = \frac{p + p'}{2p} e^{-ip'a/\hbar} A + \frac{p - p'}{2p} e^{ip'a/\hbar} B,$$

$$(30б) \quad De^{ipa/\hbar} = \frac{p - p'}{2p} e^{-ip'a/\hbar} A + \frac{p + p'}{2p} e^{ip'a/\hbar} B.$$

Като умножим (29в) с  $p'$  и приравним левите страни на (29в) и (29г), намираме

$$(31) \quad (p + p')De^{-ipa/\hbar} = (p - p')Ce^{ipa/\hbar}.$$

Да заместим  $C$  и  $D$  от (30) в (31) и от полученото равенство да изразим  $B$  чрез  $A$  при произволна енергия на частицата. Така получаваме

$$(32) \quad \frac{B}{A} = \frac{i(p^2 - p'^2) \sin(2pa / \hbar)}{2pp' \cos(2pa / \hbar) - i(p^2 + p'^2) \sin(2pa / \hbar)} e^{-i2p'a / \hbar}.$$

Коефициентът  $A$  може да бъде определен от условието за нормировка на вълновата функция и тъй като всички останали коефициенти се изразяват чрез него, съществува еднозначно определена вълнова функция на частицата при  $E > U_0$  за всяка енергия от този интервал. Това означава, че частицата има непрекъснат енергетичен спектър в този енергетичен интервал. Така пълният енергетичен спектър на частицата е смесен – той включва участъка  $0 < E < U_0$ , в който възможните стойности на енергията са дискретни, и участъка  $E > U_0$ , където енергията е непрекъсната.

С получения израз (32) можем да пресметнем коефициента на отражение от ямата

$$(33) \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(p^2 - p'^2)^2 \sin^2(2pa / \hbar)}{4p^2 p'^2 + (p^2 - p'^2)^2 \sin^2(2pa / \hbar)},$$

а като отчетем равенството  $R + T = 1$ , намираме също и коефициента на преминаване над ямата

$$(34) \quad T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = 1 - R = \frac{4p^2 p'^2}{4p^2 p'^2 + (p^2 - p'^2)^2 \sin^2(2pa / \hbar)} \\ = \left[ 1 + \frac{(p^2 - p'^2)^2 \sin^2(2pa / \hbar)}{4p^2 p'^2} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{U_0^2 \sin^2(2pa / \hbar)}{4E(E - U_0)} \right]^{-1}.$$

Ще отбележим най-характерните особености на полученото решение. Преди всичко се вижда, че при произволна енергия коефициентът на отражение  $R \neq 0$ , а коефициентът на преминаване  $T < 1$ , т.е. в квантовия случай поради вълновите свойства на частиците съществува различна от нула вероятност частицата да се отрази от ямата. Това поведение съществено се различава от класическото, при което частицата, достигайки ямата, увеличава скоростта си и преминава над нея. В класическия случай имаме  $R = 0$ ,  $T = 1$ .

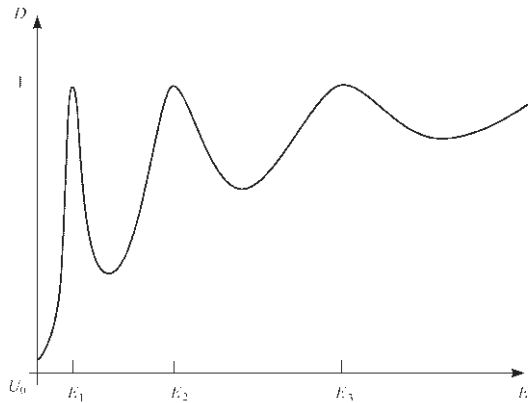
Освен това в квантовия случай може да се наблюдава поведение на частицата, аналогично на това в класическия случай. Когато

$$\sin(2pa / \hbar) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{2pa}{\hbar} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

имаме  $R = 0$ ,  $T = 1$ . Процесът на преминаване над ямата се нарича резонансно преминаване, което се дължи на отчитането на вълновите свойства на частиците. То се случва, когато дължината на вълната на Дьо Бройл е в областта над ямата  $-a \leq x \leq a$  удовлетворява условието  $n\lambda/2 = 2a$  и се наблюдава при енергии

$$(35) \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2 > U_0,$$

където  $n$  са цели положителни числа, удовлетворяващи условието  $E_n > U_0$ . На фиг. 13 е показана графиката на коефициента на преминаване  $T$  в зависимост от енергията  $E$  на частицата. Както се вижда от фигурата, наблюдава се резонансен характер на преминаването ( $T = 1$ ) при енергии  $E > U_0$ .



Фигура 13

Направеният анализ дава квантовомеханично обяснение на ефекта на Рамзауер. В опита на Рамзауер е наблюдавана прозрачност на атомите на инертните газове (VIII група) за сноп от електрони при определени стойности на енергията на електроните. Въпреки че опитът на Рамзауер изисква тримерен анализ, направеното едномерно решение не само дава качествено обяснение на резултатите от опита, но и предлага определени количествени съотношения (вж. изразите (34) и (35)).

### Заклучение

В настоящата работа на база идеите, изложени в (Avramov & Marvakov 2020), са разгледани и анализирани решенията на различни по форма правоъгълни потенциални ями и е показано по какъв начин тези решения могат да се използват за числена оценка на характерните параметри на съответната задача (широчина и дълбочина на потенциалната яма, стойности на енергетичните нива).

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### КОМПЛЕКСНИ ЧИСЛА

За да въведем и изброим основните свойства на комплексните числа, ще разгледаме квадратното уравнение

$$az^2 + bz + c = 0,$$

където  $a, b, c$  са реални числа. Решенията на уравнението са

$$z_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad z_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Когато дискриминантата  $D = b^2 - 4ac < 0$ , не съществува реално число, което да удовлетворява уравнението. За да има уравнението решение и в този случай, е необходимо разширение на понятието число, което е свързано с въвеждането на така наречената *имагинерна единица* с условието

$$i = \sqrt{-1} \Rightarrow i^2 = -1, \quad i^3 = i \cdot i^2 = -i, \quad i^4 = i \cdot i^3 = -i^2 = 1.$$

Тогава решенията се записват във вида

$$z_1 = -\frac{b}{2a} + i \frac{\sqrt{4ac - b^2}}{2a}, \quad z_2 = -\frac{b}{2a} - i \frac{\sqrt{4ac - b^2}}{2a}.$$

Число от вида  $z = x + iy$  се нарича комплексно число, където числата  $x$  и  $y$  са реални. Те се наричат съответно *реална* и *имагинерна* част на комплексното число и се означават като  $x = \operatorname{Re} z$  и  $y = \operatorname{Im} z$ . Ако  $\operatorname{Im} z = 0$ , числото  $z = x$  е реално, а ако  $\operatorname{Re} z = 0$ , числото  $z = iy$  е имагинерно.

Комплексното число е равно на нула само в случая, че реалната и имагинерната му части са равни на нула, т. е.

$$z = 0 = 0 + i0 \rightarrow x = \operatorname{Re} z = 0, \quad y = \operatorname{Im} z = 0.$$

В общия случай две комплексни числа  $z_1 = x_1 + iy_1$  и  $z_2 = x_2 + iy_2$  са равни само когато

$$z_1 = z_2 \rightarrow x_1 = x_2, \quad y_1 = y_2.$$

Действията събиране, изваждане и умножение се извършват почленно както при действие с реални числа с отчитане на свойствата на имагинерната единица. Така имаме

$$z_1 \pm z_2 = (x_1 + y_1) \pm (x_2 + iy_2) = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2),$$

$$z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + y_1 x_2),$$

като е използвано, че  $i^2 = -1$ .

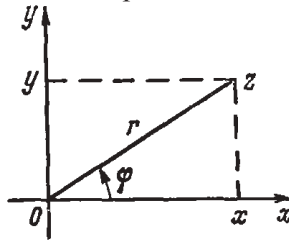
На всяко комплексно число  $z = x + iy$  може да се съпостави комплексно спрегнатото му  $z^* = x - iy$ , при което всяко реално число удовлетворява условието  $z = z^*$  ( $y = 0$ ), а  $z \cdot z^* = x^2 + y^2 = |z|^2$  е също реално. Полезни са следните свойства на всяко комплексно число

$$(1) \quad z + z^* = 2x, \quad z - z^* = 2iy, \quad x = \frac{1}{2}(z + z^*), \quad y = \frac{1}{2i}(z - z^*)$$

Тогава деленето на две комплексни числа се задава с правилото

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{x_1 x_2 + y_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2} + i \frac{y_1 x_2 - x_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2}.$$

На комплексните числа може да се даде геометрична интерпретация. Всяко реално число се задава с точка от ориентирана права. Тъй като всяко комплексно число се определя от две независими реални числа  $x$  и  $y$ , те могат да се разглеждат като правоъгълни координати на точка в равнината (фиг. 1). Представянето  $z = x + iy$  се нарича *алгебричен вид* на комплексното число. Ако изразим декартовите координати



Фигура 1

$(x, y)$  чрез полярните координати  $(r, \varphi)$ , имаме

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi.$$

След като заместим в  $z = x + iy$ , комплексното число придобива вида

$$z = r(\cos \varphi + i \sin \varphi) \rightarrow r = \sqrt{x^2 + y^2} = |z|, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}, \quad \varphi = \operatorname{Arg} z.$$

Полученото представяне е известно като *тригонометричен вид* на комплексното число, като могат да се изведат конкретни правила за действия с  $(r, \varphi)$  при извършване на алгебрични действия. Правилата силно могат да се упростят, като установим поведението на функцията на реална променлива

$$f(\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

чиито стойности са комплексни числа. Като диференцираме  $f(\varphi)$ , получаваме

$$f'(\varphi) = -\sin \varphi + i \cos \varphi = i^2 \sin \varphi + i \cos \varphi = i(\cos \varphi + i \sin \varphi) = if(\varphi).$$

Тъй като единствената функция, за която  $f'(\varphi) \sim f(\varphi)$ , е

$$f(\varphi) = e^{a\varphi} \rightarrow f'(\varphi) = a e^{a\varphi},$$

намираме формулата

$$f(\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi = e^{i\varphi},$$

установена от Леонард Ойлер и наречена в негова чест *формула на Ойлер*. Представянето  $z = r e^{i\varphi}$  се нарича *експоненциален вид* на комплексното число. Като използваме свойствата на експонентата, получаваме

$$(e^{i\varphi})^* = \cos \varphi - i \sin \varphi = \cos(-\varphi) + i \sin(-\varphi) = e^{-i\varphi}.$$

Тогава от (1), следва

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), & \sin \varphi &= \frac{1}{2i}(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}), \\ \cos(i\varphi) &= \frac{1}{2}(e^{\varphi} + e^{-\varphi}) = \operatorname{ch} \varphi, & \sin(i\varphi) &= -\frac{1}{2i}(e^{\varphi} - e^{-\varphi}) = i \operatorname{sh} \varphi, \\ z_1 z_2 &= r_1 e^{i\varphi_1} \cdot r_2 e^{i\varphi_2} = (r_1 r_2) e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}, & \frac{z_1}{z_2} &= \frac{r_1 e^{i\varphi_1}}{r_2 e^{i\varphi_2}} = \left(\frac{r_1}{r_2}\right) e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)}, & z^n &= r^n e^{in\varphi} \end{aligned}$$

Полезни допълнителни свойства на комплексните числа и други математически сведения можете да намерите в

K. Weltner et al., Mathematics for Engineers and Scientists, Springer-Dordrecht-Heidelberg- London-New York, 2009.

Klaus. Hefft, Mathematical Preparation Course Before Studying Physics, University of Heidelberg, 2013.

## ЛИТЕРАТУРА

- Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко., 2004. *Начальные главы квантовой механики*, §2.4, Москва, ФИЗМАТЛИТ.
- Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов, 2004. *Квантовая физика: Учебное пособие*, §4.2, Москва, Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана.
- СЗОКФ, 2001. *Сборник задач по общему курсу физики*, Часть 3. Под ред. В. А. Овчинкина, Москва, Изд-во МФТИ.

## REFERENCES

- Avramov, M. & Marvakov, D., 2020. First Steps in Quantum Physics: Basics – 1. Method. *Khimiya*, 29, 85 – 96.
- Karlov, N. & Kirichenko, N., 2004. *Nachalynaye glavay kvantovoy mehaniki*, §2.4. Moskva: FIZMATLIT.
- Griffiths, D., 1995. *Introduction to Quantum Mechanics*, §2.2. New York: Prentice Hall.
- Martinson, L. & Smirnov, E., 2004. *Kvantovaya fizika: Uchebnoe posobie*, §4.2. Moskva: Izd-vo MGTU im. N. E. Baumana.
- SZOKF, 2001. *Sbornik zadach po obshtemu kursu fiziki, Chasty 3*. Pod red. V. A. Ovchinkina, Moskva: Izd-vo MFTI.

## FIRST STEPS IN QUANTUM PHYSICS: BASICS – 2. MODEL EXAMPLES (SQUARE WELLS)

**Abstract.** Cases of a particle in a one-dimensional square well – infinitely deep and with finite depth – are also analyzed in detail. As an example, the adsorption of a hydrogen atom on a metal surface by a qualitative and accurate solution of the problem is considered.

**Keywords:** quantum physics; square well; metal surface; adsorption

✉ **Dr. Mihail Avramov**

Web of Science ResearcherID: B-5481-2010

Author ID (SCOPUS): 6701414288

ORCID iD: 0000-0001-8128-4946

Faculty of Chemistry

University of Sofia

1, James Bourchier Blvd.

1164 Sofia, Bulgaria

E-mail: mavramov@chem.uni-sofia.bg

✉ **Dr. Dimitar Marvakov**

Author ID (SCOPUS): 6506098047

Faculty of Physics

University of Sofia

5, James Bourchier Blvd.

1164 Sofia, Bulgaria

E-mail: marvakov@phys.uni-sofia.bg