Рассмотрим стационарное уравнение Шрёдингера: если $U = 0$, то

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = 0$$

Тогда можно искать решения в виде $\psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\theta(\vec{r})$, то есть

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\theta + Ee^{\frac{-iEt}{\hbar}}\theta = 0$$

Или

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\theta + E\theta = 0$$

Получаем, что $\psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\theta(\vec{r}) = \left(\cos\frac{-Et}{\hbar} + i\sin\frac{-Et}{\hbar}\right)\theta(\vec{r})$

Из этого волновое число $k = \frac{2mE}{\hbar^2}$

В общем случае для $U \neq 0$, зная, что $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U = \hat{H}$, получаем $\hat{H}\psi = E\psi$

Так как $\hat{H}$ – линейный оператор, то у него есть соответствующая матрица, для которой можно найти собственные числа. Так как $E \in$, значения энергии E и являются собственными числами, а функции ψ – собственными векторами

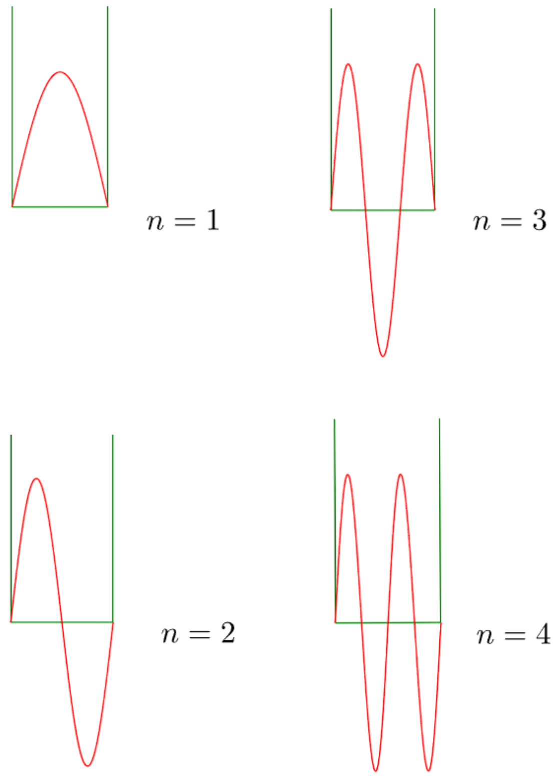
Огромное число задач можно свести к такой модели: потенциальная яма $U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ U_0, & \text{иначе} \end{cases}$

В ней вероятность встретить частицу за пределами ямы равен 0, то есть $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Если стенки бесконечно большие, то волновая функция представляет собой синусоиду $\psi = \psi_0\sin(\omega x)$, где $\omega = \frac{n\pi}{L}$

После нормировки получаем $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}$

Энергия для соответствующей функции равна $E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

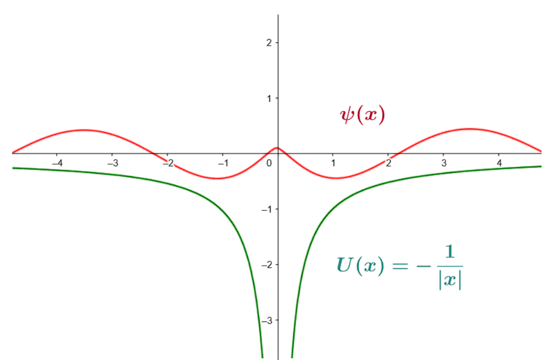
Если яма шириной в $L = 1$ м, а масса $m = 1$ кг, то минимальная энергия при $n = 1$ имеет вид $\frac{\pi^2\hbar^2}{2} \approx 4 \cdot 10^{-66}$ – энергия дискретна, но на каждом шаге изменяется на 10^{-66}



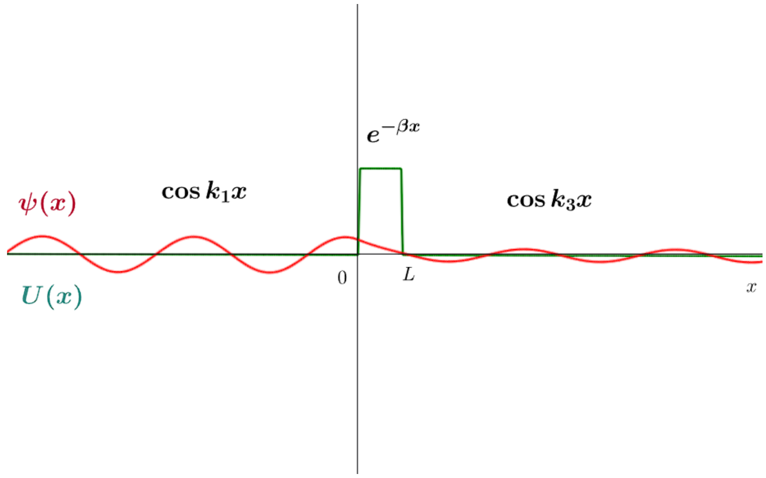
Также можно представить гиперболу – модель атома Бора

Подставив множество атомов, получаем множество гипербол, а в трехмерном пространстве получаем сетку, решив волновое уравнение для которой получаем зонную структуру вещества

Получаем 2 пространства: где решений волнового уравнения нет – так называемая запрещенная зона энергий; и где решения есть – разрешенная зона



Тривиально уравнение Шрёдингера аналитически решается для модели с потенциальным прямоугольным барьером с конечными длиной и высотой $U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 \le x \le L \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$



Если $E < U_0$, то существует ненулевая вероятность, что электрон перескочит барьер, а если $E > U_0$, то электрон беспрепятственно проходит

В общем случае любой барьер можно представить как композицию прямоугольных барьеров

Если волновая функция в барьере не успевает экспоненциально спасть, то выходит из барьера

Слева от барьера, где $U = 0$ уравнение имеет вид $\Delta\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$

Поэтому $\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$, где $k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ – волновое число

Здесь часть $A_1 e^{ikx}$ – волна, идущая вправо на барьер, а часть $B_1 e^{-ikx}$ – отраженная от нее волна. Если не учитывать отраженную волну, то действительная часть (ψ_1) является косинусоидальной волной $A_1 \cos(k_1 x)$

Внутри барьера $U = U_0$, уравнение принимает вид $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0$

В рассматриваемой задаче частицы, прошедшие в область барьера, при движении в этой области никаких препятствий не встречают, поэтому отраженного потока в этой области быть не должно, то есть амплитуда отраженной волны в области барьера равна нулю

Поэтому для случая $E < U_0$ получаем $\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x}$, где $\beta = ik_2$ – экспоненциальный спад

Так как ψ – непрерывная функция, то $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, $\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$

Получаем, что $A_1 + B_1 = A_2$ и $A_1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1}A_2$

То есть $A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A_1$, $B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A_1$

Таким образом, коэффициент отражения волны $R = \frac{B_1^2}{A_1^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}\right)^2$

В третьей области также получаем $\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}$

Тут $A_3 = A_1 e^{-\beta L}$

В этой задаче возникает туннельный эффект – преодоление объекта потенциального барьера в случае, когда её полная энергия меньше высоты барьера

Представим такую систему: стеклянная пластинка, а по сторонам от нее прозрачный слой с меньшим показателем преломления. Свет внутри пластинки испытывает внутреннее отражение, что согласуется с геометрической оптикой и законом преломления, так как $\sin\theta_2 = \frac{n_1}{n_2}\sin\theta_1 > 1$, но с точки зрения квантовой механики свет в этом слою испытывает затухание

Если между двумя такими пластинками поместим тонкий слой с меньшим показателем преломления, то свет будет способен проходить через него, несмотря на то, что $\sin\theta_2 > 1$

Также туннельный эффект используется в сканирующем туннельном микроскопе: на конце очень острого электрода создаётся очень маленькое расстояние порядка атомов до поверхности образца: электроны туннелируют между кончиком и образцом, и измеряемый туннельный ток чрезвычайно чувствителен к расстоянию и локальной плотности состояний поверхности

Коэффициентом прозрачности барьера считается величиной $D = \left(\frac{A_3}{A_1}\right)^2 = e^{-2\beta l} = e^{-\frac{2l}{\hbar}\cdot\sqrt{2m(U_0-E)}}$

Для произвольного барьера $D = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U(x)-E)}dx}$

Из этого можно найти коэффициент отражения $R = 1 - D$

Если барьер представляет параболу, то получаем модель колебаний атомов в двухатомной молекуле, или так называемый квантовый гармонический осциллятор $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

В нем минимальная энергия – $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Последующие задаются формулой $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

В реальной жизни правая ветвь параболы после порогового значения становятся нулю – это значит, что атомы нарушили свою связь. Если парабола несимметрична, то говорят, что осциллятор ангармонический

При колебаниях молекула излучает электромагнитные волны в инфракрасном спектре