Bây giờ chúng ta sẽ áp dụng phương trình sóng Schrodinger cho một số bài toán cụ thể với các hàm thế khác nhau. Những trường hợp này sẽ minh họa các phương pháp được dùng để giải phương trình Schrodinger và kết quả của những trường hợp này sẽ cung cấp cho chúng ta kiến thức về hành vi của electron trong các thế năng khác nhau. Chúng ta sẽ dùng những kết quả được rút ra để thảo luận về tính chất của bán dẫn. Đầu tiên, xét chuyển động của một electron trong không gian tự do. Nếu không có lực tác động lên hạt thì hàm thế V(x) sẽ bằng 0. Do đó, từ phương trình (2.13) phương trình sóng không phụ thuộc thời gian có thể được viết làĐây là nghiệm sóng chạy, điều đó có nghĩa là hạt di chuyển trong không gian tự do được biễu diễn bằng sóng chạy. Số hạng đầu tiên, với hệ số A là sóng chạy theo hướng +x, còn số hạng thứ hai với hệ số B là sóng chạy theo hướng –x. Giá trị của những hệ số này sẽ được xác định từ điều kiện biên. Chúng ta sẽ gặp lại nghiệm sóng chạy của electron trong tinh thể hoặc vật liệu bán dẫn. Giả sử rằng chúng ta có một hạt di chuyển theo hướng +x, nó sẽ được mô tả bởi sóng chạy +x, hệ số B=0. Chúng ta có thể viết nghiệm sóng chạy dưới dạng

Một hạt tự do với năng lượng xác định cũng sẽ có bước sóng và động lượng xác định. Hàm mật độ xác suất ψ(x,t)ψ\*(x,t)=AA\*, là hằng số không phụ thuộc vị trí. Hạt tự do với động lượng xác định có thể được tìm thấy với xác suất bằng nhau ở mọi nơi. Kết quả này phù hợp với nguyên lí bất định Heisenberg: động lượng sẽ dẫn đến vị trí không xác định.1.gif Một hạt tự do định xứ được xem như bó sóng (được hình thành bằng cách chồng chất nhiều hàm sóng với động lượng khác nhau). Chúng ta sẽ không xem xét bó sóng ở đây.2.3.2 Giếng thế vô hạn

Bài toán hạt chuyển động trong giếng thế vô hạn là ví dụ điễn hình về hạt liên kết. Thế V(x) là hàm theo tọa độ được biễu diễn trong hình 2.5. Hạt được giả sử tồn tại trong vùng II, cũng có nghĩa là nó bị giam trong vùng không gian xác định.

Từ phương trình (2.13) suy ra phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian trong trường hợp này là (2.13)ở đây E là năng lượng toàn phần của hạt. Nếu E xác định, hàm sóng phải bằng 0 cả trong vùng I và III. Hạt không thể xuyên qua hàng rào thế xác định này, vì vậy xác suất tìm thấy hạt trong vùng I và vùng III bằng 0 Phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian trong vùng II, ở đây V=0 là