Reševanje problemov kvantne mehanike. V klasični mehaniki imamo podano začetno lego in hitrost delca, od koder uporabimo drugi Newtonov zakon in izračunamo njegovo nadaljnje gibanje. V kvantni mehaniki imamo podano začetno valovno funkcijo delca, od koder uporabimo Schroedingerjevo enačbo in računamo časovno odvisnost lege in hitrosti z uporabo operatorjev:
Schroedingerjeva enačba:

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

Razvoj pričakovanega položaja in hitrosti po času:

$$\langle x(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

$$\langle p(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\,\mathrm{d}x\right)$$

Reševanje Schroedingerjeve enačbe je do zdaj potekalo tako, da smo poiskali stacionarna stanja in rekli, da je stanje delca vedno nekakšna kombinacija teh stanj. Torej:

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

Primer: Vodikov atom ima lastne energije $E_1 = -13.6\,\mathrm{eV} =: \mathrm{Ry}$, $E_2 = \mathrm{Ry}/4 \ldots E_n = \mathrm{Ry}/n^2$, kjer je Ry definirana kot Rydbergova energija. Stanje elektrona okoli vodikovega atoma opišemo s štirimi kvantnimi števili, in sicer n, l, m, m_s. Zaradi tega pride do tako imenovane degeneracije, ko ima več stanj isto energijo.

Stanja s pozitivno energijo. V vodikovem atomu je neskončno število vezanih stanj (stanj, v katerih je $E_n < 0$), toda popolnoma verjetno je, da bo imel elektron tudi pozitivno energijo in na atom vodika ne bo več vezan. Izkaže se (tega ne bomo posebej izpeljevali), da za nevezano "lastno" stanje zadošča katera koli pozitivna vrednost energije. Dobimo torej zvezen spekter energij, pri vezanih stanjih pa smo imeli diskreten spekter.

Lastnosti stacionarnih stanj. Recimo, da neko stanje ni degenerirano. Velja torej $H\psi(x) = E\psi(x)$. Opazimo pa, da lahko namesto ψ v enačbo vstavimo $\lambda\psi$, kjer je λ nek realen koeficient, in še vedno dobimo lastno funkcijo.
Zahtevamo lahko normalizirano funkcijo:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|\,\mathrm{d}x = 1$$

Če je ψ takšna funkcija, imamo zdaj omejitev $|\lambda| = 1$. To pomeni, da je $\lambda = \exp i\alpha$, kjer je α poljubno realno število. Navidez imamo še vedno precej svobode pri izbiri lastnih funkcij in naše "nedegenerirano" stanje še vedno opisuje neskončno mnogo funkcij. Z matematičnega stališča to pomeni, da popolnoma nedegenerirana stanja ne obstajajo, iz meritev pa vidimo, da faktor $\exp i\alpha$ ne vpliva na nobeno merljivo količino.
V primeru degeneriranih stanj, ko imamo rešitvi $\psi^{(1)}$ in $\psi^{(2)}$, lahko iz njiju delamo linearne kombinacije, ki so še vedno rešitve.

$$H\left[\alpha\psi^{(1)}(x) + \beta\psi^{(2)}(x)\right] = E\left[\alpha\psi^{(1)}(x) + \beta\psi^{(2)}(x)\right]$$

Če imamo torej lastne funkcije ψ_n, lahko neko stanje ψ zapišemo kot linearno kombinacijo le-teh:

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n\psi_n(x);\ c_n = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)$$

Potencialna jama. Izračunati želimo vezana lastna stanja končne potencialne jame.

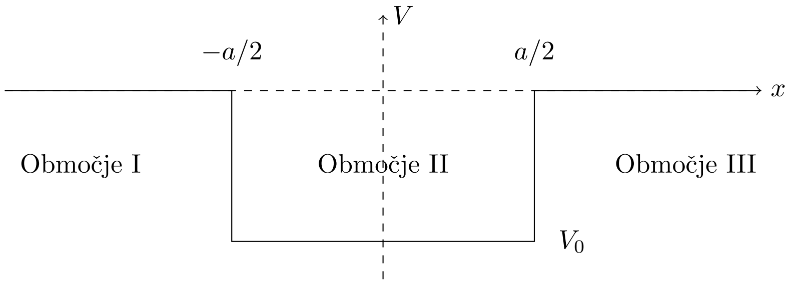
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + V(x)$$

V končni potencialni jami je

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \in [-a/2, a/2] \\ 0, & \text{sicer} \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Vemo, da bo rešitev oblike



$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x},\ \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx},\ k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x}$$

Po potrebi lahko valovno funkcijo v območjuih I in III izrazimo kot linearno kombinacjo hiperboličnih funkcij (sinh in cosh), v območju II pa s kotnimi funkcijami (sin in *cos*). Ob predpostavki, da je stavnje vezano, lahko zahtevamo $B = F = 0$. Nazadnje upoštevamo robne pogoje, da mora biti valovna funkcija vseskozi zvezna in zvezno odvedljiva, kar nam da sistem linearnih enačb. Ta pa je rešljiv, če je determinanta matrike koeficientov različna 0 - determinanto 4×4 matrike sicer lahko izračunamo, se nam pa obeta kar nekaj dela, še posebej, ker koeficienti niso konstantni.
To smo počeli pri Moderni fiziki I. Zdaj se bomo problema lotili drugače. Vzemimo stacionarno Schroedingerjevo enačbo v eni dimenziji ($H\psi(x) = E\psi(x)$) z dodatno predpostavko, da je $V(x) = V(-x)$. Naša potencialna jama temu pogoju ustreza. Pri zrcaljenju $x \mapsto -x$ se Hamiltonova funkcija ne spremeni, torej velja:

$$H\psi(-x) = E\psi(-x)$$

Zdaj bomo pogledali dva primera, in sicer degeneriranon stanje in nedegenerirano stanje.
Nedegenerirano stanje: Veljati mora $\psi(-x) = e^{i\alpha}\psi(x)$ Spet naredimo transformacijo $x \mapsto -x$:

$$\psi(x) = e^{i\alpha}\psi(-x) = e^{i\alpha}\psi(x)$$

Od tod sledi $e^{i\alpha} = \pm 1$, torej je *psi* gotovo bodisi liha, bodisi soda.
Če je E degenerirana, lahko podobno pokažemo (tega ne bomo posebej izpeljevali), da je $\psi(x) + \psi(-x)$ soda in $\psi(x) - \psi(-x)$ liha funkcija.
Zdaj rešujemo enačbo dvakrat, in sicer posebej za sode in lihe funkcije. To nam precej poenostavi računanje (ker je dovolj zveznost in zvezno odvedljivost zagotoviti le na eni strani jame). Vzemimo najprej primer, ko naj bo ψ soda funkcija.

$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x},\ \psi_{II}(x) = B\cos(kx)\ \psi_{III}(x) = Ae^{-\kappa x}$$

$$\psi_{III}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) \Rightarrow Ae^{-\kappa\frac{a}{2}} = B\cos\left(k\frac{a}{2}\right)$$

$$\psi'_{III}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi'_{II}\left(\frac{a}{2}\right) \Rightarrow Ae^{-\kappa\frac{a}{2}} = B\sin\left(k\frac{a}{2}\right)$$

Sledi:

$$\kappa = k \tan\left(a\frac{a}{2}\right)$$

Podobno storimo za liho funkcijo: spet zadošča zahtevati zveznost in odvedljivost le na eni strani, recimo med območjema I in II. Dobimo

$$-\kappa = k \cot\left(k\frac{a}{2}\right)$$

Dobili smo transcendentalni enačbi za k in κ. Če ju uspemo rešiti (poiskati njune ničle), lahko iz njiju izluščimo lastne energije. Spomnimo se, da je

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{in} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

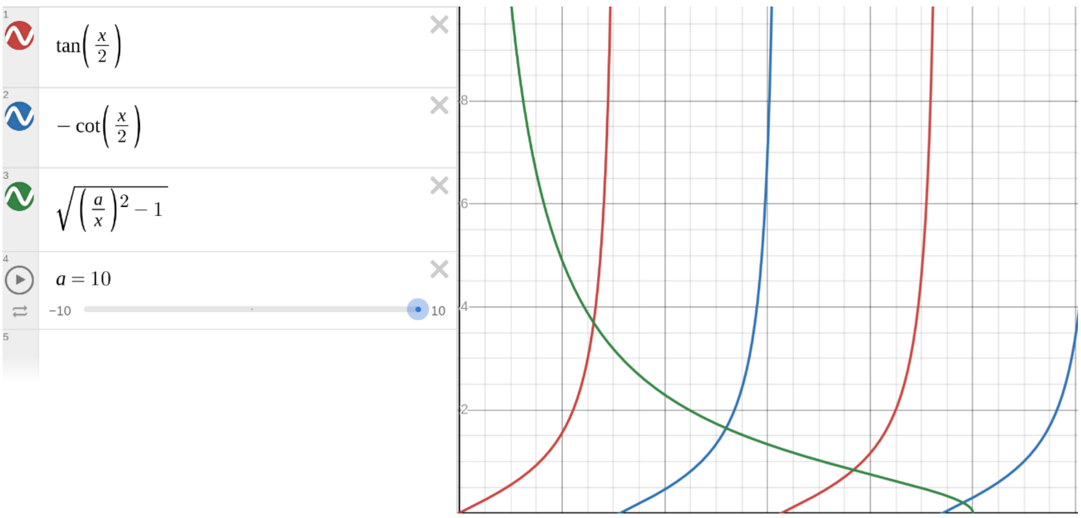
Enačbi bomo prepisali v lepšo obliko. Če označimo $u \equiv ka$ in $u_0^2 = (ka)^2 + (\kappa a)^2$, lahko zapišemo

$$-\cot\frac{u}{2} = \frac{\sqrt{u_0^2 - u^2}}{u} = \sqrt{\frac{u_0^2}{u^2} - 1}$$

$$\tan\frac{u}{2} = \frac{\sqrt{u_0^2 - u^2}}{u} = \sqrt{\frac{u_0^2}{u^2} - 1}$$

Vizualno (s skico grafov funkcij $\tan\frac{u}{2}$, $\cot\frac{u}{2}$ in $\sqrt{\left(\frac{u_0}{u}\right)^2 - 1)}$ lahko označimo presečisca med grafi, ki predstavljajo vezana stanja. Ugotovimo, da je število vezanih stanj enako

$$N = \lfloor\frac{u_0}{\pi}\rfloor + 1$$



Ker lahko za u_0 kar izberemo poljubno pozitivno število, lahko število lastnih stanj brez težav določimo, vedno pa imamo vsaj eno.
To ne spremeni dejstva, da imamo opravka z analitično nerešljivima enačbama. Nekaj več lahko povemo o limitnih primerih. Ko gre $u_0 \to \infty$, gre število lastnih stanj proti neskončno, ravno tako se vrednosti presečišč med grafi premikajo proti vrednostim $n\pi,\ n \in \mathbb{N}$. Sledi:

$$\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2m(E_n + V_0)}{\hbar^2}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - V_0$$

Rezultat je konsistenten z rezultati pri predmetu Moderna Fizika I (razlika je le v konstanti V_0 zaradi drugačne izbire izhodišča).

Poglejmo limito $V_0 \to \infty,\ a \to 0$, pri čemer zahtevajmo $V_0 a = \lambda =$ konst.. Tedaj dobimo kar delta funkcijo: $V(x) = -\lambda\delta(x)$. Zdaj poglejmo, kaj se zgodi v limiti $u_0 \to 0$.

$$\tan\frac{u}{2} = \sqrt{\frac{u_0^2}{u^2} - 1}$$

Označimo $\varepsilon = u_0 - u$, torej $u = u_0 - \varepsilon$. Ko se u manjša proti 0, lahko tangens razvijemo po Taylorju do prvega člena.

$$\frac{u_0 - \varepsilon}{2} = \sqrt{\left(\frac{u_0}{u_0 - \varepsilon}\right)^2 - 1}$$

Ker pri dovolj majhnih ε velja $\varepsilon \ll \sqrt{\varepsilon}$, zanemarimo člen izven korena in dobimo:

$$\frac{u_0}{2} \approx \sqrt{2\frac{\varepsilon}{u_0}}$$

Vmes smo znotraj korena vrednost $u_0/(u_0 - \varepsilon)$ preobrazili v $\dfrac{1}{1 - \varepsilon/u_0}$ in razvili po Taylorju.
Sledi $u_0^3 = 8\varepsilon$. Vstavimo v enačbo za k (kajti $u = ka$):

$$\left(k = \frac{u}{a} = \frac{u_0 - \varepsilon}{a} =\right) \frac{u_0 - u_0^3/8}{a} = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$$

Na obeh straneh kvadriramo, zanemarimo člen u_0^6 in upoštevamo $V_0 a = \lambda$. Dobimo

$$E_0 = -\frac{m}{2\hbar}^2 \lambda^2$$

Valovna funkcija za tako stanje je oblike

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa_0 |x|}$$

Določimo lahko $\kappa_0 = m\lambda/\hbar^2$. Da funkcijo noramliziramo, računamo

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi^2(x)|\,\mathrm{d}x = 2\int_0^{\infty} A^2 e^{-2\kappa_0 x}\,\mathrm{d}x$$

Privzeli smo, da smemo za A vzeti realno vrednost. Vemo namreč, da lahko valovno funkcijo pomnožimo s poljubno konstanto $e^{i\alpha},\ \alpha \in \mathbb{R}$, ne da bi pri tem spremenili katero koli merljivo količino. Sledi torej:

$$2A^2\left(-\frac{1}{2\kappa_0}e^{-2\kappa_0 x}\Big|_0^{\infty}\right) = 1$$

$$-\frac{1}{\kappa_0}A^2(0 - 1) = 1$$

$$A^2 = \kappa$$

Komentar: Opravka imamo z valovno funkcijo, ki je zvezna, ni pa zvezno odvedljiva. V naravi potencial, kakršnega smo ga imeli v tej limiti, ne obstaja, temveč imamo v primeru zelo ozke in globoke potencialne jame znotraj jame ozko območje, v katerem je valovna funkcija oblike $\cos x$. Ta je zvezno odvedljiva in z valovno funkcijo nimamo več težav.