

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

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

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  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

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  $E \in \mathbb{C}$ , значения энергии  $E$  и являются собственными числами, а функции  $\psi$  – собственными векторами

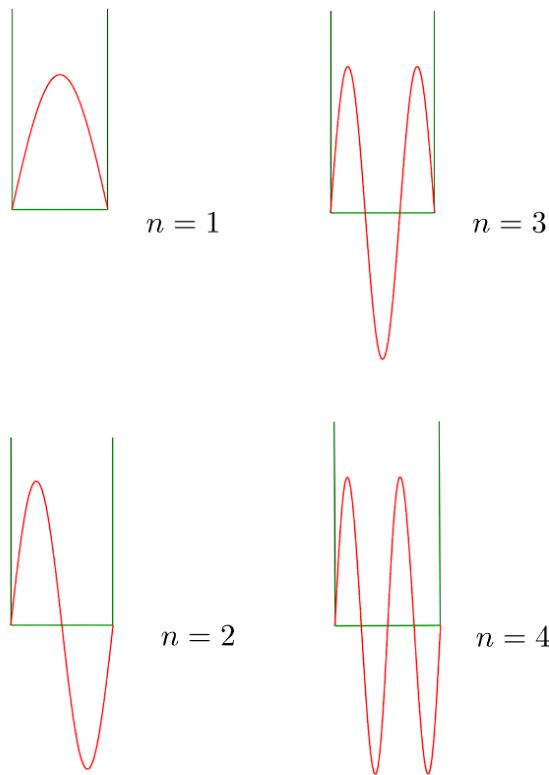
Огромное число задач можно свести к такой модели: потенциальная яма  $U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ U_0, & \text{иначе} \end{cases}$

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  $E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$

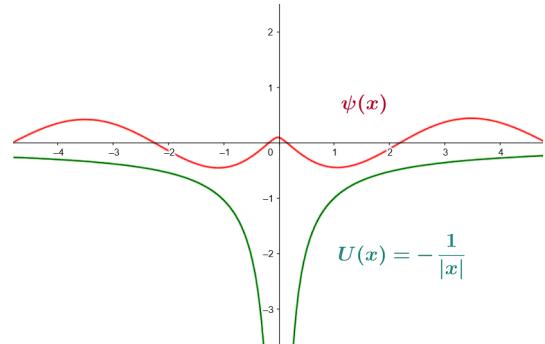
Если яма шириной в  $L = 1$  м, а масса  $m = 1$  кг, то минимальная энергия при  $n = 1$  имеет вид  $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \approx 4 \cdot 10^{-66}$  – энергия дискретна, но на каждом шаге изменяется на  $10^{-66}$



Также можно представить гиперболу – модель атома Бора

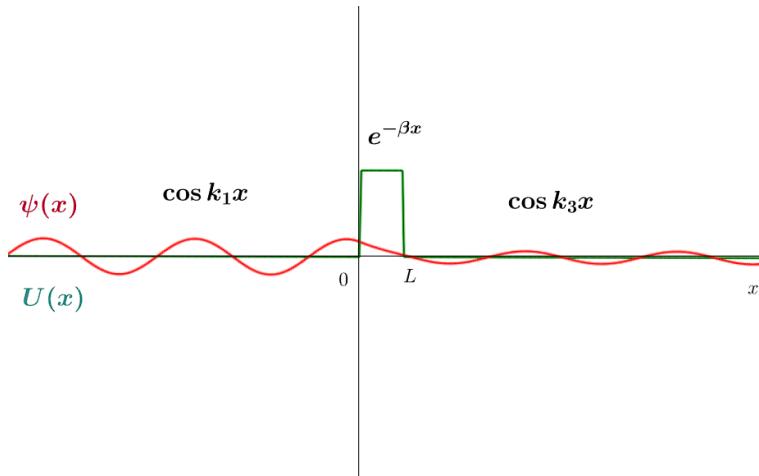
Подставив множество атомов, получаем множество гипербол, а в трехмерном пространстве получаем сетку, решив волновое уравнение для которой получаем зонную структуру вещества

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

$$\text{барьером с конечными длиной и высотой } U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 \leq x \leq L \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$



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 барьера

Если волновая функция в барьере не успевает экспоненциально спастись, 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  $A_1 e^{ik_1 x}$  – волна, идущая вправо на барьер, а часть  $B_1 e^{-ik_1 x}$  – отраженная от нее волна. Если не учитывать отраженную волну, то действительная часть ( $\psi_1$ ) 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  $\psi$  – непрерывная функция, то  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ,  $\frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=0}$

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

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

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

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 пластина, а по сторонам от нее прозрачный слой с меньшим показателем преломления. Свет внутри пластины 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 слое испытывает затухание

Если между двумя такими пластинами 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  $D = \left( \frac{A_3}{A_1} \right)^2 = e^{-2\beta l} = e^{-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0-E)}}$

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  $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

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

В реальной жизни правая ветвь параболы после порогового значения становится 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

