# Примеры решения стационарного уравнения Шредингера

$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(\vec{r})\psi = E\psi \quad \Longleftarrow \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Аналитическое решение можно получить только для некоторых простых модельных систем.

| диф. ур-е в частных производных 2-го порядка с переменными коэфф. $U(\vec{r})$ (при произвольн. функции $U(\vec{r})$ не решается в элементарн. функциях (степени, тригонометр., логарифм.)

---

I) одномерное ур-е с кусочно-постоянным потенциалом $U(\vec{r}) = U(x) = \begin{cases} U_1 = \text{const} \\ U_2 = \text{const} \end{cases}$ при $x_1 < x < x_2$

(1) $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$, $U = \text{const}$

это есть ур-е гармонического осциллятора по $x$

а) $E > U$, обозн. $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}$

(1) $\to$ (1') $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

$\psi = \alpha_1 \cos kx + \alpha_2 \sin kx = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$

т.к. $e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx$ ← формула Эйлера

$\cos kx = \frac{1}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx})$

$\sin kx = \frac{1}{2i}(e^{ikx} - e^{-ikx})$

б) $E < U$, обозн. $\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$, $k = i\varkappa$

(1) $\to$ (1'') $\frac{d^2\psi}{dx^2} - \varkappa^2\psi = 0$

$\psi = \alpha_1 \operatorname{ch}\varkappa x + \alpha_2 \operatorname{sh}\varkappa x = A_1 e^{\varkappa x} + A_2 e^{-\varkappa x}$

$\operatorname{ch}\varkappa x = \frac{1}{2}(e^{\varkappa x} + e^{-\varkappa x})$

$\operatorname{sh}\varkappa x = \frac{1}{2}(e^{\varkappa x} - e^{-\varkappa x})$

общее решение ур-я $-\infty < x < \infty$: однозначно, конечно, непрерывно с интегрируемым квадратом: $\int |\psi|^2 dx = 1$

# II) Свободное одномерное движение

$$U(x) = 0, \quad E > 0, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad \omega = \frac{1}{\hbar}E$$

из Ia):

(2) $\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$ — сумма плоских монохром волн

вправо (1) влево (2)

Если $A_2 = 0$, то $\psi = A_1 e^{ikx}$ — своб. движение частицы вправо по X

обозначим: $p = \hbar k$

(3) $\boxed{\psi_0 = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}px}}$ ←

$\hat{H}\psi_0 = E\psi_0 \rightarrow \boxed{E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$ ← собств. значения операторов

$\hat{\vec{p}}\,\psi_0 = p\psi_0 \rightarrow p = \hbar k$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ — оператор энергии, $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ — оператор импульса

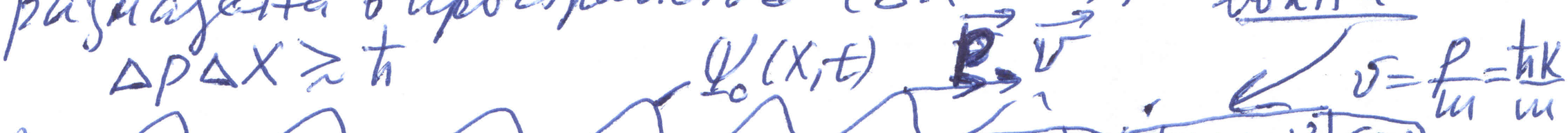
$\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H} = 0$

E и p одновременно измеримы, т.к.

Вероятность найти частицу $|\psi_0(x,t)|^2 = |A_0|^2 = \text{const}$ независит от x и t

(частица с опред. импульсом p ($\Delta p = 0$) размазана в пространстве ($\Delta x = \infty$)) — плоская волна

$\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar$




Плотность потока вероятности $j = v|\psi|^2 = v|A_0|^2 = \frac{\hbar k}{m}|A_0|^2$ (3)

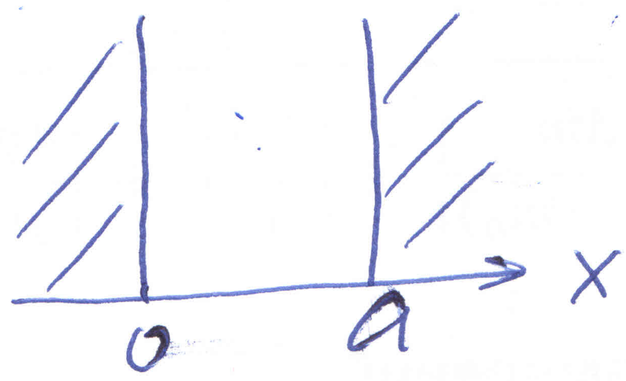
Если $A_1 = 0$, то такая же волна бежит влево по X.

Если $A_1 = \pm A_2$, то стоячая волна $A_1 \rightarrow \quad \leftarrow A_2$

две волны бегут навстречу

## III) Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими потенциальн. стенками

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




Вне ямы $\psi(x)=0$, ~~$U=\infty$~~.

Внутри ямы I а) с граничными условиями $\psi(0)=0$, $\psi(a)=0$

$0\le x\le a$

$$\psi=\alpha_1\cos kx+\alpha_2\sin kx\ ,\quad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0E}\ ,\quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$$

из $\psi(0)=0\Rightarrow\alpha_1=0$, т.е. $\boxed{\psi=\alpha_2\sin kx}$

из $\psi(a)=0\Rightarrow\sin ka=0\Rightarrow ka=n\pi\Rightarrow$

$$\boxed{k_n=\frac{n\pi}{a}}\quad(4)$$

и

$$\boxed{E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}}\quad(5)$$

$n=1,2,3,\dots$ главное квант. число (номер стац. состояния)

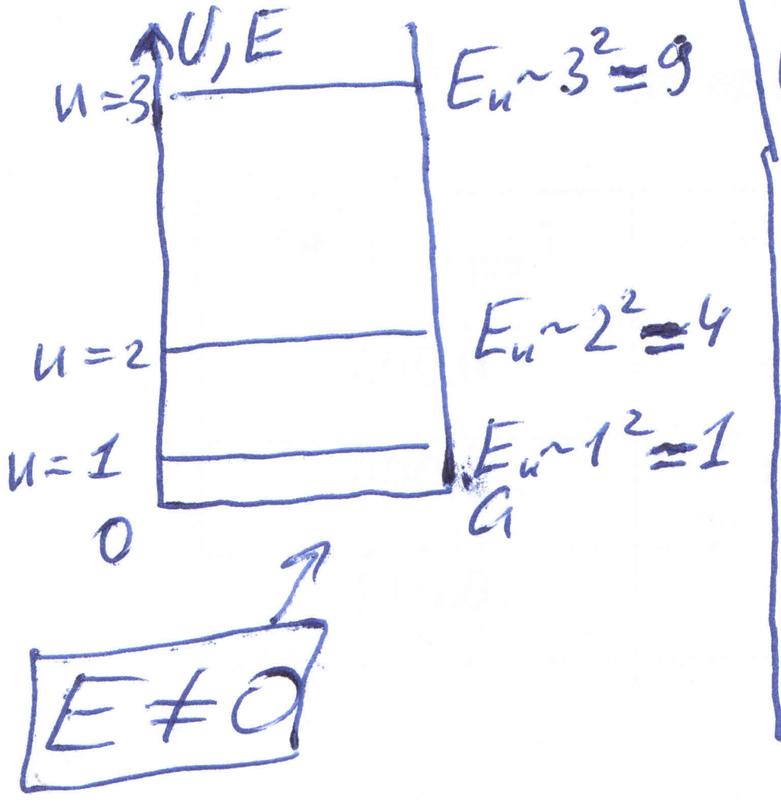
спектр дискретный

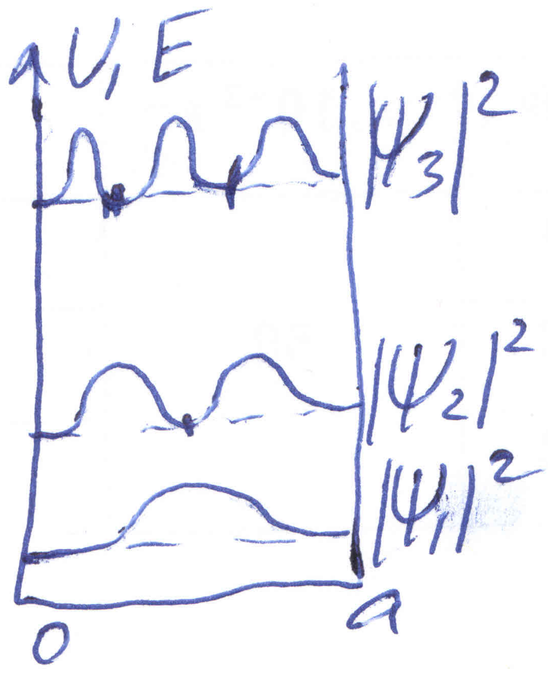
Нормировка $\int_0^a|\psi(x)|^2dx=1\to\alpha_2^2\cdot\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\,dx=1$

$\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\,dx=a/2$

откуда: $\alpha_2=\sqrt{\frac{2}{a}}$, т.е.

$$\boxed{\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{\ell}x}\quad(6)\ ,\quad n=1,2,3,\dots$$






стоячие волны

с закрепленными концами (одномерный резонатор)

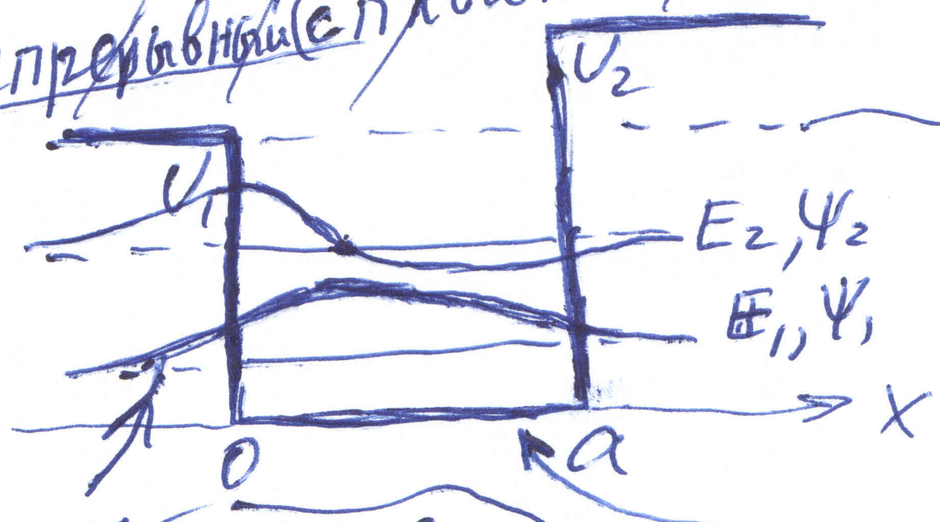
(узлы и пучности)

при $n\gg1$

$$\Delta E_n=E_{n+1}-E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}(2n+1)\approx\frac{\pi^2\hbar^2}{m_0a^2}n\ll E_n$$

## IV) Потенц. яма конечной глубины

непрерывный (сплошной) спектр энергии




$U_1 < E < \infty$

$0 < E_n < U_1$

дискретный спектр

I а)

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\alpha_1 x}, & x < 0 \\ A_2 \cos k_2 x + B_2 \sin k_2 x, & 0 \le x \le a \\ B_3 e^{-\alpha_3 x}, & x > a \end{cases}$$

I б) подбарьерное проникновение

---

## V) Квантовый линейный гармонический осциллятор

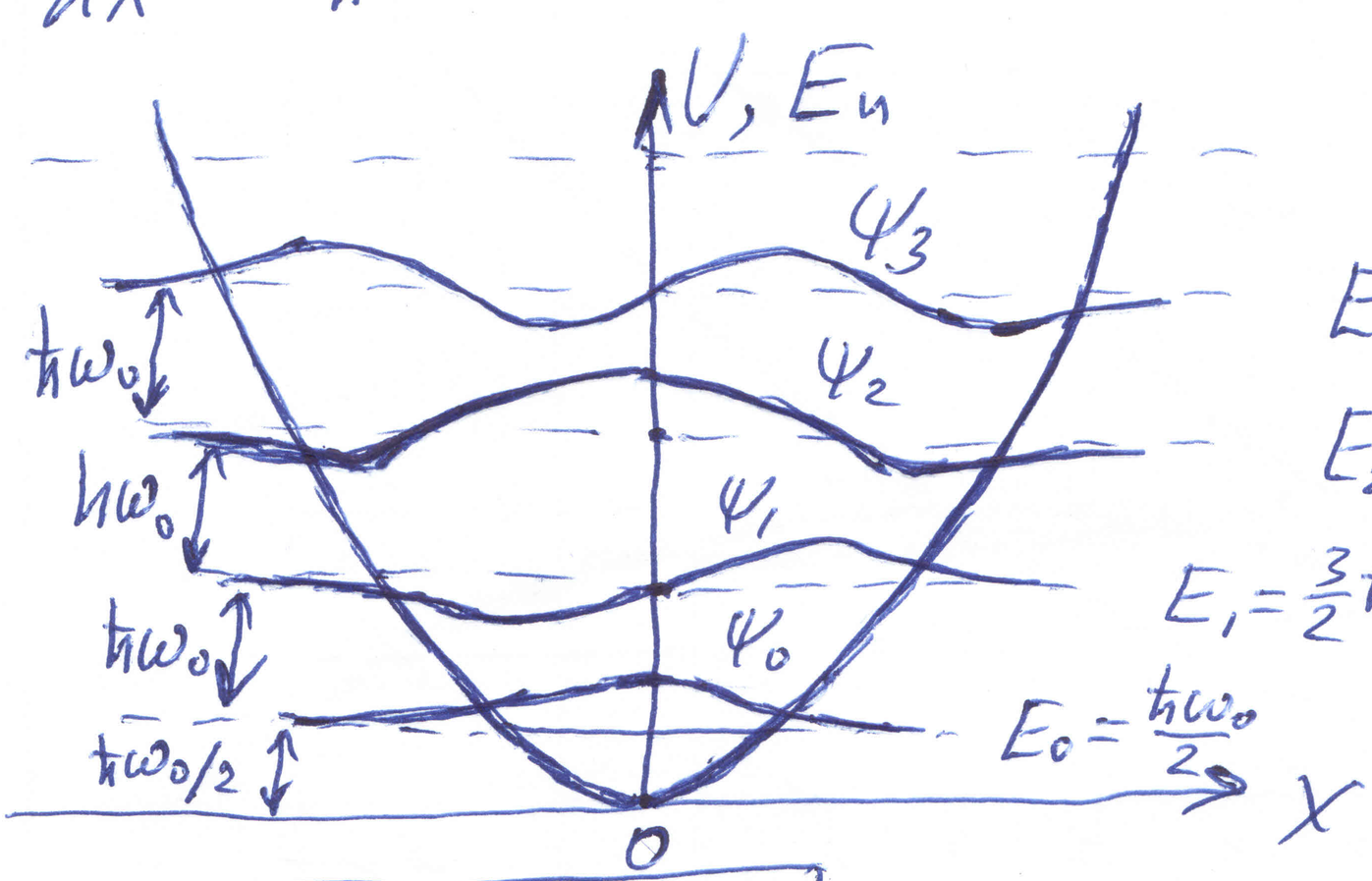
(7) $$\boxed{U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}}$$ $-\infty < x < +\infty$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$$

, решения

$$\psi_n \sim e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}} H_n(x)$$

полином Эрмита




$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega_0$

$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_0$

$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$

$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$

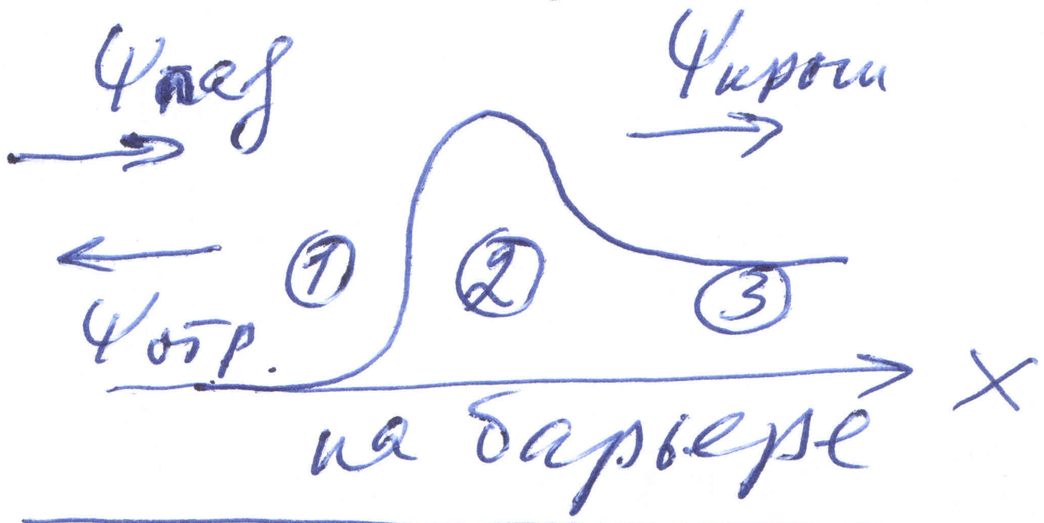
(8) $$\boxed{E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

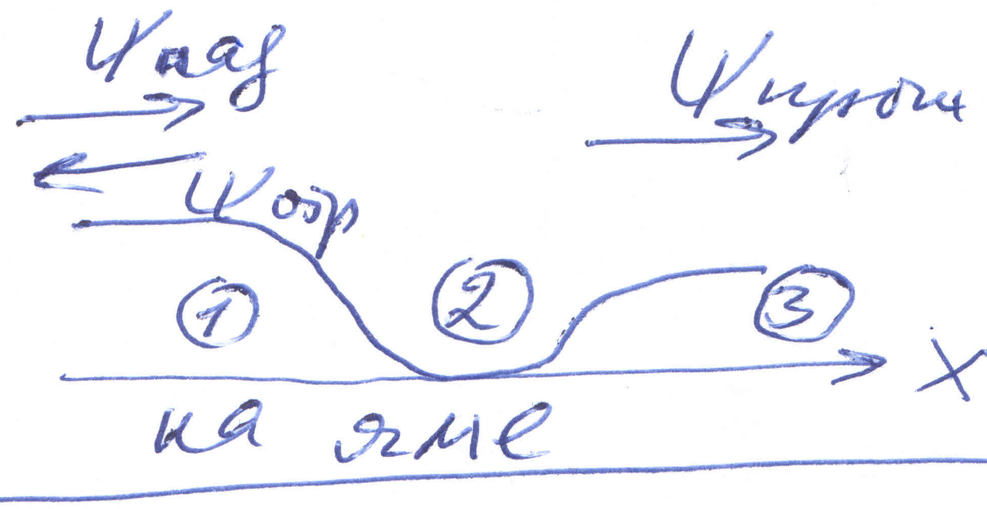
эквидистантный спектр

$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$

$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ – энергия нулевых колебаний

# VI) Одномерное рассеяние (в непрерывном спектре E) (дифракция?)




при $X \to -\infty$

$\psi_{пад} = A_1 e^{iK_1 X}$

$\psi_{отр} = B_1 e^{-iK_1 X}$

в обл ① случ. Ia)

$K_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_1)}$

$U_1 = U(-\infty)$

при $X \to +\infty$

$\psi_{прошед} = A_3 e^{iK_3 X}$

в обл ③ случ Ia)

$K_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_3)}$

$U_3 = U(+\infty)$

$j_{пад} = \frac{\hbar}{m} K_1 |A_1|^2 = v_1 |A_1|^2$

$j_{отр} = \frac{\hbar}{m} K_1 |B_1|^2 = v_1 |B_1|^2$

$j_{прош} = \frac{\hbar}{m} K_3 |A_3|^2 = v_2 |A_3|^2$

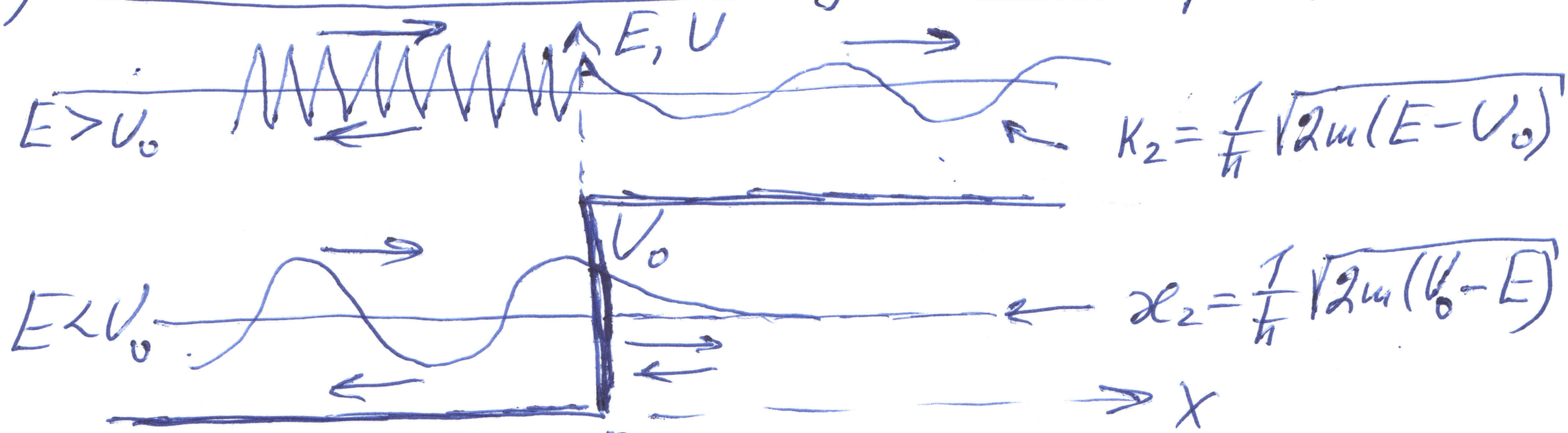
$R = \frac{j_{отр}}{j_{пад}} = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2$ – коэффициент отражения

(9) $T = D = \frac{j_{прош}}{j_{пад}} = \frac{K_3}{K_1}\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$ – коэффициент прохождения (прозрачности)

$\boxed{R+T=1}$, т.к. $\boxed{j_{пад} = j_{отр} + j_{прош}}$ – зак. сохран-я плотности вер-ти

Туннельный эффект – квантовая частица может быть обнаружена (может оказаться) в области пространства, недоступной для классической частицы (под потенц. барьером, или прийти за потенц. барьер)

# а) Потенциальная ступенька (прямоугольная) (6)




$$K_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_0)}$$

$$\varkappa_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}$$

$$K_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}, \quad E > 0$$

$$K_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_0)}, \quad E > U_0$$

$$\varkappa_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}, \quad E < U_0$$

$x<0$: $\psi_- = A_1 e^{iK_1 x} + B_1 e^{-iK_1 x}$

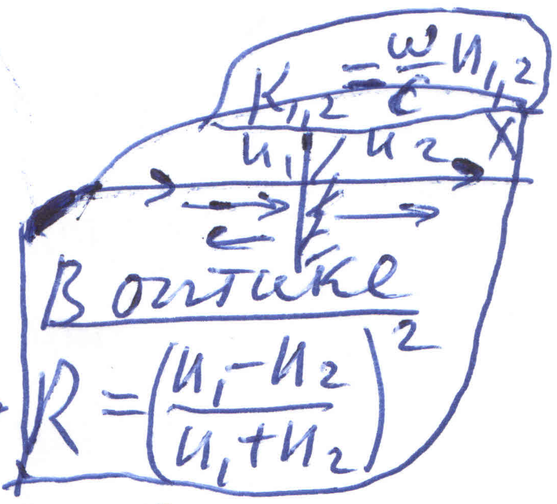
$x>0$: $\psi_+ = \begin{cases} B_2 e^{iK_2 x} \\ B_2 e^{-\varkappa_2 x} \end{cases}$, $A_2 = 0$, $A_2 = 0$, из гран. условия на $x = +\infty$

Сшивая эти решения в точке $x=0$:

$$\psi_-(0) = \psi_+(0)$$

$$\psi_-'(0) = \psi_+'(0)$$

$E > U_0$: $\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2 \\ K_1(A_1 - B_1) = K_2 B_2 \end{cases}$ или $\begin{cases} 1 + \frac{B_1}{A_1} = \frac{B_2}{A_1} \\ 1 - \frac{B_1}{A_1} = \frac{K_2}{K_1}\frac{B_2}{A_1} \end{cases}$




откуда $\frac{B_1}{A_1} = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}$, $\frac{B_2}{A_1} = \frac{2K_1}{K_1 + K_2}$

то есть $\boxed{R = \left(\frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}\right)^2}$, $\boxed{T \equiv D = \frac{2K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2}}$ (10)

$E < U_0$ $\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2 \\ iK_1(A_1 - B_1) = -\varkappa_2 B_2 \end{cases}$ или $\begin{cases} 1 + \frac{B_1}{A_1} = \frac{B_2}{A_1} \\ 1 - \frac{B_1}{A_1} = i\frac{\varkappa_2}{K_1}\frac{B_2}{A_1} \end{cases}$

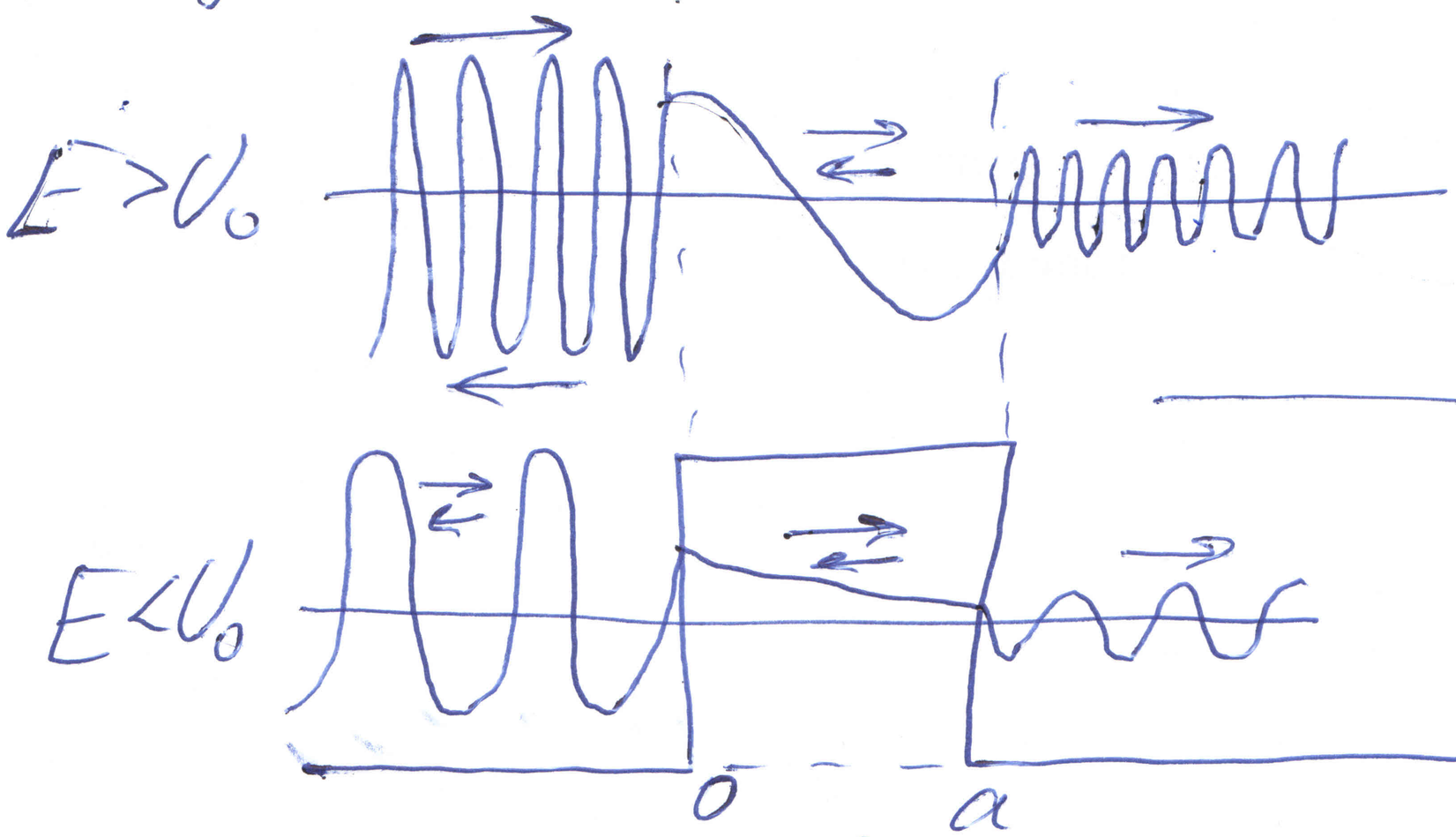
откуда $\frac{B_1}{A_1} = \frac{iK_1 + \varkappa_2}{iK_1 - \varkappa_2}$ ⇐ вычисл. и знам. комплексно сопряж.

$B_2 = \frac{2iK_1}{iK_1 - \varkappa} A_1 \neq 0$

то есть $R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = 1$, $T = 0$ ($j_{прош} = 0$, $j_{изл} = j_{отр}$) (11)

из зак. сохранения плот. вер-ти

# Прямоугольный потенциальный барьер (7




$$K_1 = K_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_u E}$$

$$K_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_u (E - U_0)}$$

---

$$K_1 = K_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_u E}$$

$$\varkappa_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_u (U_0 - E)}$$

слева $x<0$: $\psi \equiv \psi_1 = A_1 e^{iK_1 x}$ (пад.) $+ B_1 e^{-iK_1 x}$ (отраж.)

в области барьера $0<x<a$: $\psi \equiv \psi_2 = \begin{cases} A_2 e^{iK_2 x} + B_2 e^{-iK_2 x}, & E>U_0 \\ A_2 e^{\varkappa_2 x} + B_2 e^{-\varkappa_2 x}, & E<U_0 \end{cases}$

справа $x>a$: $\psi \equiv \psi_3 = A_3 e^{iK_1 x}$, $B_3 = 0$

Сшиваем при $x=0$: $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$

при $x=a$: $\psi_2(a) = \psi_3(a)$, $\psi_2'(a) = \psi_3'(a)$

} 4 граничных условия, связывающие 4 коэф-та $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3$

Нас интересуют

$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 \quad \text{и} \quad T \equiv D = \frac{K_3}{K_1}\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$$

причем $\boxed{R+T=1}$ закон сохран. плотности потока вероятности

т.е. $R = 1 - T$

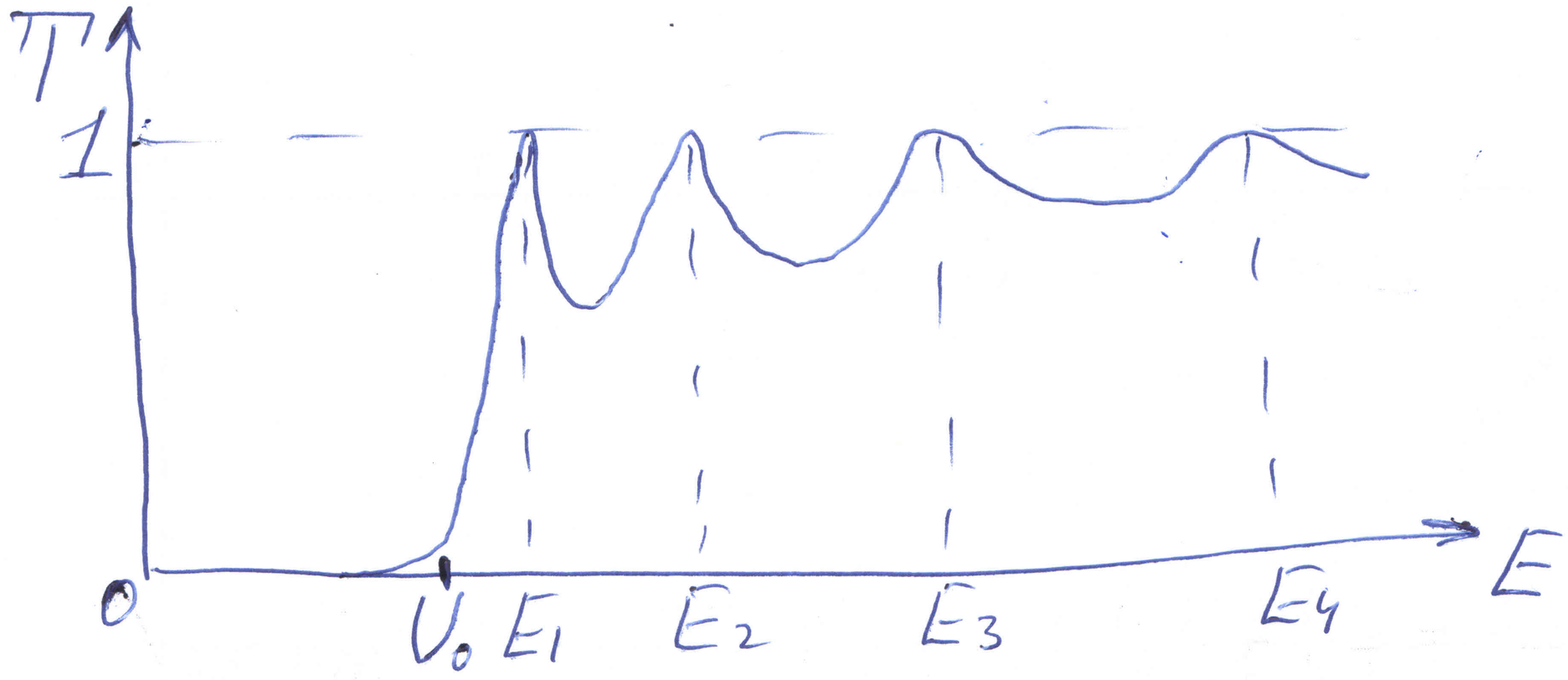
исключая $A_2$ и $B_2$ имеем

$E>U_0$:

$$\boxed{T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{K_1}{K_2} - \frac{K_2}{K_1}\right)^2 \sin^2 K_2 a}} \quad (12)$$

$E<U_0$:

$$\boxed{T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{K_1}{\varkappa_2} + \frac{\varkappa_2}{K_1}\right)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa_2 a}} \quad (13)$$




из (12): резонансная прозрачность $T=1$
при $\sin k_2 a = 0$, т.е. $k_2 a = n\pi$, $k_2 = \frac{n\pi}{a}$ или $\lambda = n\frac{a}{2}$

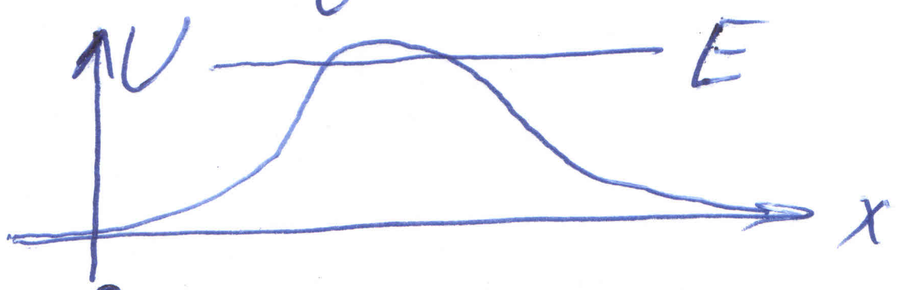
из (13): при $\varkappa_2 a \gg 1$, т.е. $E - U_0 \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ (сильно слабая прозрачность)

(13') $\boxed{T \approx \frac{16}{\left(\frac{k_1}{\varkappa_2} + \frac{\varkappa_2}{k_1}\right)^2} \cdot e^{-\varkappa_2 a}}$ т.к. $\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \approx \frac{1}{2} e^x$ при $x \gg 1$

Осторожно! В учебниках формула ($D \equiv T$)

(14) $D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}a} = D_0 e^{-\varkappa_2 a}$

где $\boxed{D_0 \approx 1\ ?}$




это квазиклассическая формула, справедлива только при $\frac{dU}{dx} \ll \frac{U}{\lambda}$ или $\lambda \ll \frac{U}{(dU/dx)}$
для гладких потенциалов, когда $dU/dx$ – мало

У нас потенциал прямоугольный: $\frac{dU}{dx} = \infty$ при $x=0$ и $x=a$
Надо пользоваться точной формулой (12) и (13),
видно, что (13') похоже на (14), но $D_0 \neq 1$

## Аналогия с оптикой (дифракция и интерференция)

электромагнитные волны ур-е (волн)

$$\Delta\vec{E} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0 \leftarrow \text{эл.-магн. волн. ур-е}, \quad v = \frac{c}{n(x)} = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon(x)}}, \quad n = \sqrt{\varepsilon}, \quad \mu = 1$$

показатель преломления

т.е. $\Delta\vec{E} - \frac{\varepsilon(x)}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0$

монохроматическая волна $\vec{E} = \vec{E}(x)e^{i\omega t}$ $\Big|$ $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\Delta\vec{E}(x) + \varepsilon(x)\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\vec{E}(x) = 0, \text{ т.к. } \frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = -\omega^2\vec{E}$$

$$K(x) = \frac{2\pi}{\lambda(x)} = \frac{\omega}{v(x)} = \frac{\omega}{c}n(x) = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon(x)}$$

$$\boxed{\frac{d^2\vec{E}}{dx^2} + K^2(x)\vec{E} = 0} \qquad K^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\varepsilon(x)$$

---

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \leftarrow \text{волновое ур-е Шредингера}$$

стац. состояние $\Psi = \psi(x)e^{-i\omega t} \rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0$$

$$\boxed{K(x) = \frac{2\pi}{\lambda(x)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U(x))}}$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + K^2(x)\psi = 0}$$

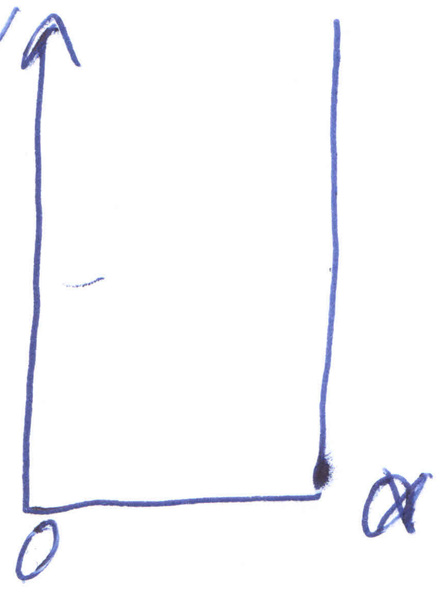
---

потенциальная энергия аналог диэлектрической проницаемости (показатель преломления)

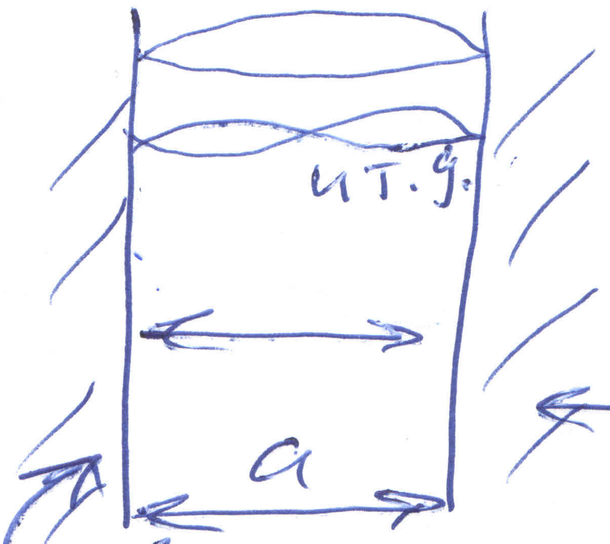
$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)) \longleftrightarrow \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\varepsilon(x) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2(x)$$

↑ знак (-)

потенц. яма

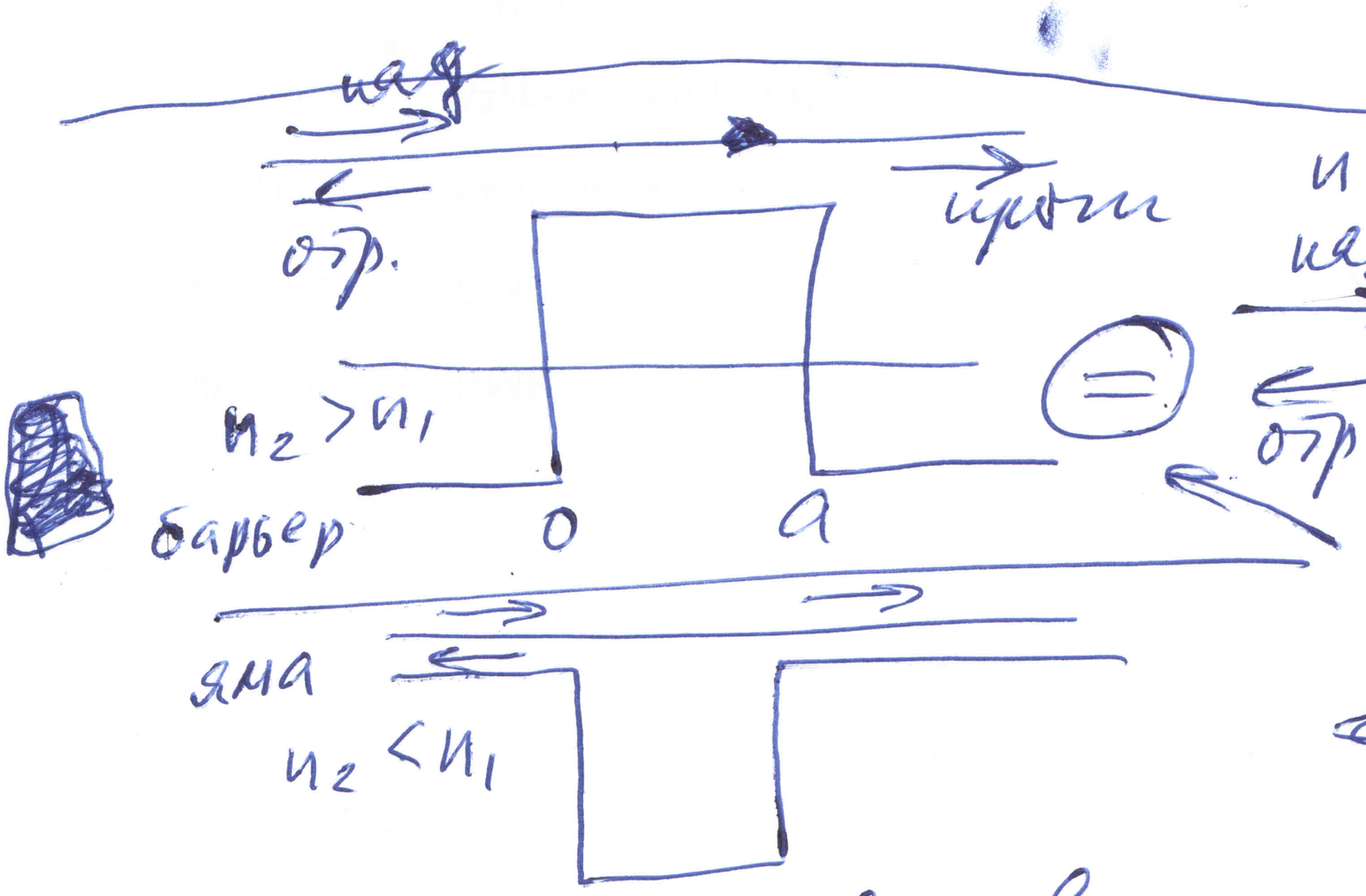


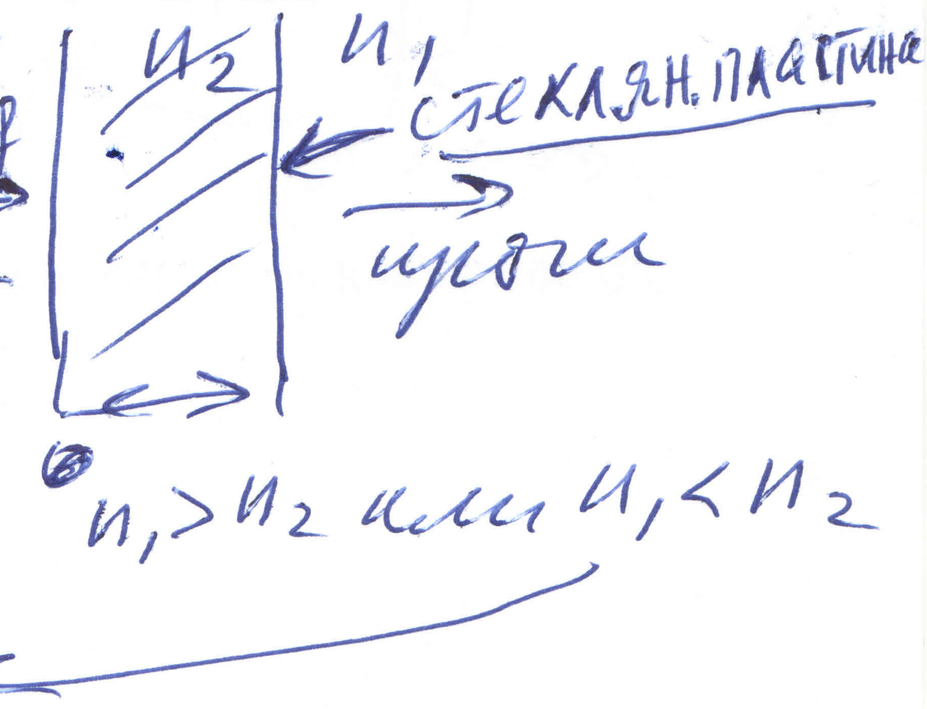

≡




два зеркала
= резонатор
стоячие волны $K_n = \frac{n}{a} = \frac{2n}{\lambda_n}$

$$\boxed{\lambda_n = \frac{2a}{n}} \text{ или } \boxed{n\frac{\lambda_n}{2} = a}$$




туннельный эффект в оптике или полное внутр. отражение

световод (диэл. волновод)

$$K_\perp = \frac{n\pi}{a} \text{ – стоящ.}$$

$$K_{II} = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ – бегущ.}$$

$$\frac{\sin i}{\sin 2} = \frac{n_2}{n_1} \rightarrow \sin i_0 = \frac{n_2}{n_1} < 1$$

$\sin 2_0 = 1$ ↗ $i > i_0$