Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m_e}\dfrac{d^2}{dx^2} + U(x)$ – явный вид гамильтониана,

m_e – масса электрона,

$U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

Электрон в потенциальной яме конечной глубины (связанные состояния)

В этом случае $U(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ -|U_0|, & |x| < a \end{cases}$

$E = -|E|$-энергия связанного электрона.

<u>Уравнение Шредингера в области $|x| < a$</u>

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2} - |U_0|\right)\psi(x) = -|E|\psi(x) \tag{1}$$

Или

$$k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0| - |E|\right)$$

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = A\cos(kx) + D\sin(kx),\ \ |x| < a$$

$A\cos(kx)$ – чётная функция,

$D\sin(kx)$ – нечётная функция.

Чётные состояния

$$\psi(x) = A\cos(kx),\ \ |x| < a$$

Уравнение Шредингера в области $x > a$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x) = -|E|\psi(x)$$

$$\psi''(x) - \frac{2m_e}{\hbar^2}|E|\psi(x) = 0$$

$$\psi''(x) - \alpha^2\psi(x) = 0,\ \ \alpha^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}|E|$$

$$\psi(x) = Be^{-\alpha x} + Ce^{\alpha x},\ \ x > a$$

$$\psi(x)=\begin{cases} A\cos(kx), & |x|<a \\ Be^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

Расчёт постоянных A и B

условие непрерывности функций в точке $x=a$

$$\psi(x)\ \Big|_{x=a-0}=\psi(x)\ \Big|_{x=a+0}$$

условие гладкости функций в точке $x=a$

$$\psi'(x)\ \Big|_{x=a-0}=\psi'(x)\ \Big|_{x=a+0}$$

$$\psi'(x)=\begin{cases} -kA\sin(kx), & |x|<a \\ -\alpha Be^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\cos(ka)=Be^{-\alpha a} \\ kA\sin(ka)=\alpha Be^{-\alpha a} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\cos(ka)-Be^{-\alpha a}=0 \\ kA\sin(ka)-\alpha Be^{-\alpha a}=0 \end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} \cos(ka) & -e^{-\alpha a} \\ k\sin(ka) & -\alpha e^{-\alpha a} \end{vmatrix}=0$$

$$-\alpha e^{-\alpha a}\cos(ka)+ke^{-\alpha a}\sin(ka)=0$$

$$k^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0|-|E|\right)$$

$$k=\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0|-|E|\right)}$$

$$ka=a\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0|-|E|\right)}=\sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2-\frac{2m_e|E|}{\hbar^2}a^2}$$

$$-\alpha\cos(ka)+k\sin(ka)=0$$

$$tg(ka)=\frac{\alpha}{k}$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}|E|}$$

$$ka=x$$

$$\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2=\beta^2$$

$$x^2=\beta^2-(\alpha a)^2\Rightarrow(\alpha a)=\sqrt{\beta^2-x^2}$$

$$tg(ka)=\frac{\alpha}{k}$$

$$(ka)tg(ka)=\alpha a$$

$$x\cdot tg(x)=\sqrt{\beta^2-x^2}\Rightarrow x_1,x_2,x_3,...$$

В точках πn тангенс обращается в ноль

В точках $\frac{\pi}{2}+\pi n$ тангенс обращается в бесконечность

один корень

$$\beta < \pi$$

$$\sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \pi \Rightarrow \frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2 < \pi^2 \Rightarrow |U_0| < \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_e a^2}$$

$$|U_0| < \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_e a^2}$$

2 корня

$$\pi < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < 2\pi$$

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_e a^2} < |U_0| < \frac{(2\pi)^2\hbar^2}{2m_e a^2}$$

3 корня

$$2\pi < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < 3\pi$$

$$\frac{(2\pi)^2\hbar^2}{2m_e a^2} < |U_0| < \frac{(3\pi)^2\hbar^2}{2m_e a^2}$$

Нечётные состояния

Уравнение Шредингера в области $|x| < a$

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

$$k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0| - |E|\right)$$

$$\psi(x) = A\sin(kx), \quad |x| < a$$

Уравнение Шредингера в области $x > a$

$$\psi''(x) - \alpha^2\psi(x) = 0, \quad \alpha^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}|E|$$

$$\psi(x) = Be^{-\alpha x} + Ce^{\alpha x}, \quad x > a$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(kx), & |x| < a \\ Be^{-\alpha x}, & x > a \end{cases}$$

Расчёт постоянных A и B

условие непрерывности функций в точке $x = a$

$$\psi(x)\Big|_{x=a-0} = \psi(x)\Big|_{x=a+0}$$

условие гладкости функций в точке $x = a$

$$\psi'(x)\Big|_{x=a-0} = \psi'(x)\Big|_{x=a+0}$$

$$\psi'(x)=\begin{cases} kA\cos(kx), & |x|<a \\ -\alpha Be^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\sin(ka)=Be^{-\alpha a} \\ kA\cos(ka)=-\alpha Be^{-\alpha a} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\sin(ka)-Be^{-\alpha a}=0 \\ kA\cos(ka)+\alpha Be^{-\alpha a}=0 \end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} \sin(ka) & -e^{-\alpha a} \\ k\cos(ka) & \alpha e^{-\alpha a} \end{vmatrix}=0$$

$$\alpha e^{-\alpha a}\sin(ka)+ke^{-\alpha a}\cos(ka)=0$$

$$ctg(ka)=-\frac{\alpha a}{ka}$$

$$ka=\sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2-\frac{2m_e|E|}{\hbar^2}a^2}$$

$$\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2=\beta^2$$

$$ka=x$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}|E|}$$

$$x\cdot ctg(x)=-\alpha a$$

$$(\alpha a)=\sqrt{\beta^2-x^2}$$

$$-x\cdot ctg(x)=\sqrt{\beta^2-x^2}\Rightarrow x_1,x_2,x_3,\ldots$$

Нули $ctg(x)\Rightarrow \pi\frac{1}{2},\pi\frac{3}{2},\pi\frac{5}{2},\pi\frac{7}{2},\ldots$

Точки разрыва $ctg(x)\Rightarrow 0,\pi,2\pi,3\pi,\ldots$

Нет корней $-x\cdot ctg(x)=\sqrt{\beta^2-x^2}$

$$\beta<\frac{\pi}{2}$$

$$\sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2}<\frac{\pi}{2}$$

$$\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2<\left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

$$|U_0|<\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2m_ea^2}$$

1 корень

$$\frac{\pi}{2}<\beta<\pi\frac{3}{2}$$

$$\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \pi\frac{3}{2}$$

2 корня

$$\pi\frac{3}{2} < \beta < \pi\frac{5}{2}$$

$$\pi\frac{3}{2} < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \pi\frac{5}{2}$$

Электрон в потенциальной яме конечной глубины вблизи бесконечно высокой стенки

(связанные состояния)

В этом случае

$$U(x)=\begin{cases} 0, & x>a \\ -|U_0|, & 0<x<a \\ \infty, & x<0 \end{cases}$$

$E=-|E|$-энергия связанного электрона.

<u>Уравнение Шредингера в области</u> $\underline{0<x<a}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2}-|U_0|\right)\psi(x)=-|E|\psi(x)$$

$$k^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(|U_0|-|E|\right)$$

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=0$$

$$\psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx),\ \ 0<x<a$$

$$\psi(x)=A\sin(kx),\ \ 0<x<a$$

Уравнение Шредингера в области $x>a$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x)=-|E|\psi(x)$$

$$\psi''(x)-\frac{2m_e}{\hbar^2}|E|\psi(x)=0$$

$$\psi''(x)-\alpha^2\psi(x)=0,\ \ \alpha^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}|E|$$

$$\psi(x)=Be^{-\alpha x}+Ce^{\alpha x},\ \ x>a$$

$$\psi(x)=Be^{-\alpha x},\ \ x>a$$

$$\psi(x)=\begin{cases} A\sin(kx), & 0<x<a \\ Be^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

Расчёт постоянных A и B

условие непрерывности функций в точке $x=a$

$$\psi(x)\ \big|_{x=a-0}=\psi(x)\ \big|_{x=a+0}$$

условие гладкости функций в точке $x=a$

$$\psi'(x)\ \big|_{x=a-0}=\psi'(x)\ \big|_{x=a+0}$$

$$\psi'(x)=\begin{cases} kA\cos(kx), & |x|<a \\ -\alpha Be^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\sin(ka)=Be^{-\alpha a} \\ kA\cos(ka)=-\alpha Be^{-\alpha a} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\sin(ka) - Be^{-\alpha a} = 0 \\ kA\cos(ka) + \alpha Be^{-\alpha a} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} \sin(ka) & -e^{-\alpha a} \\ k\cos(ka) & \alpha e^{-\alpha a} \end{vmatrix} = 0$$

$$\alpha e^{-\alpha a}\sin(ka) + ke^{-\alpha a}\cos(ka) = 0$$

$$ctg(ka) = -\frac{\alpha a}{ka}$$

$$ka = \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2 - \frac{2m_e|E|}{\hbar^2}a^2}$$

$$\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2 = \beta^2$$

$$ka = x$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}|E|}$$

$$x \cdot ctg(x) = -\alpha a$$

$$(\alpha a) = \sqrt{\beta^2 - x^2}$$

$$-x \cdot ctg(x) = \sqrt{\beta^2 - x^2} \Rightarrow x_1, x_2, x_3, ...$$

Нули $ctg(x) \Rightarrow \pi\frac{1}{2}, \pi\frac{3}{2}, \pi\frac{5}{2}, \pi\frac{7}{2}, ...$

Точки разрыва $ctg(x) \Rightarrow 0, \pi, 2\pi, 3\pi, ...$

Нет корней

$$\beta < \frac{\pi}{2}$$

$$\sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \frac{\pi}{2}$$

$$\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2 < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

$$|U_0| < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_e a^2}$$

1 корень

$$\frac{\pi}{2} < \beta < \pi\frac{3}{2}$$

$$\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \pi\frac{3}{2}$$

2 корня

$$\pi\frac{3}{2} < \beta < \pi\frac{5}{2}$$

$$\pi\frac{3}{2} < \sqrt{\frac{2m_e|U_0|}{\hbar^2}a^2} < \pi\frac{5}{2}$$