Ein partikkel i 3 dimensjonar

Kvantemekanisk beskrivelse av ein partikkel som kan bevege seg i 3 dimensjonar

Bølgjefunksjon: $\Psi(x,y,z,t) = \Psi(\vec{r},t)$

Tolking: $|\Psi(x,y,z,t)|^2\,dx\,dy\,dz$ er sannsynlegheiten for, ved tida t, å finne partikkelen innanfor eit infinitesimalt volum dV = dx dy dz rundt punktet (x,y,z)

Dette gir normeringsbetingelsen som må tilfredsstillast av fysisk akseptable bølgjefunksjonar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz\,|\Psi(x,y,z,t)|^2 = 1$$

Observablane posisjon og bevegelsesmengd har no 3 komponentar kvar, så dei tilsvarande operatorane har også 3 komponentar:

Posisjon:

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z$$ m.a.o $$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

Bevegelsesmengd:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$ m.a.o. $$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

Andre observablar er funksjonar av posisjons- og/eller bevegelsesmengd-operatoren:

$$F = F(\vec{r}, \vec{p}) \quad \Rightarrow \quad \hat{F} = F(\vec{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla)$$

Viktig eksempel: Energioperatoren (``Hamilton-operatoren''):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})$$

Forventningsverdi: $\langle F \rangle = \int d^3r \, \Psi^* \hat{F} \Psi$

(Den tidsavhengige) Schrødingerlikninga (TASL): $\hat{H}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$

Stasjonære tilstander: $\Psi_\alpha(\vec{r},t) = \psi_\alpha(\vec{r}) \, e^{-iE_\alpha t/\hbar}$

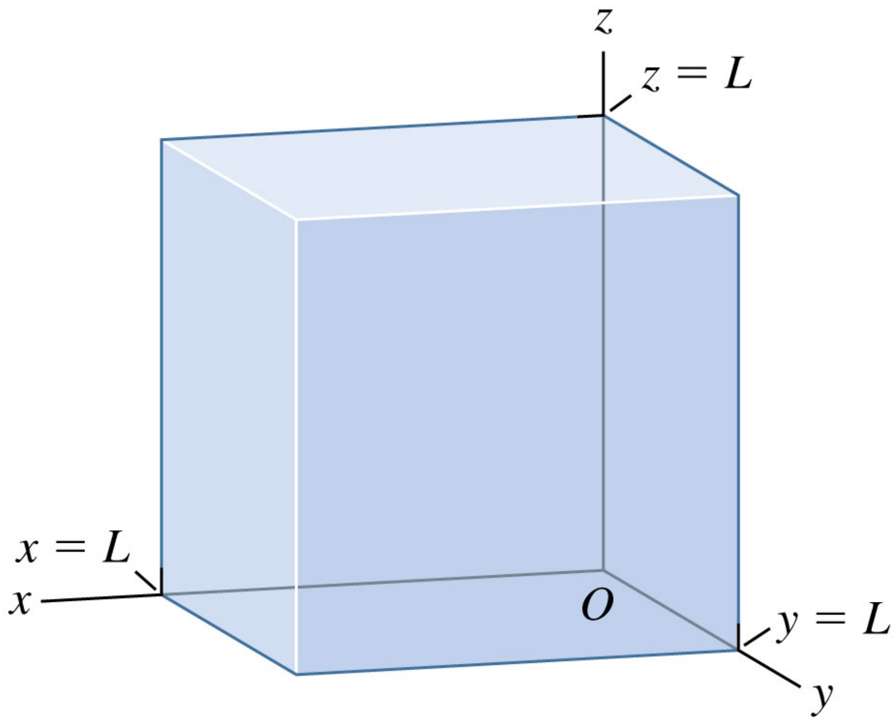
Den tidsuavhengige Schrødingerlikninga (TUSL): $\hat{H}\psi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha \psi_\alpha(\vec{r})$

Merk at i 3 dimensjonar vil indeksen α som karakteriserer dei stasjonære tilstandene sin posisjons-avhengigheit bestå av 3 kvantetal (i 1 dimensjon trengst kun 1 kvantetal).

Oppsummering: Ingen overraskingar her, alt generaliserer slik ein ville gjette frå 1 til 3 romdimensjonar!

Partikkel i 3-dimensjonal boks

Boks med lengde L i kvar av dei 3 retningane.
Potensiell energi U(x,y,z) er 0 inni boksen
og uendeleg stor utanfor.



Vi finn dei stasjonære tilstandene ved å løyse TUSL

$\psi(\vec{r}) = 0$ utanfor boksen og dermed også på kantane av boksen, dvs.

$$\psi(x, y, z) = 0 \text{ for } x = 0, x = L, y = 0, y = L, z = 0, z = L$$

TUSL inni boksen (der U = 0):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right)=E\psi(x,y,z)$$

Prøver separasjon av variablar: anta at løysingane har forma

$$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$$

Set inn I TUSL, som då blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(Y(y)Z(z)\frac{d^2X(x)}{dx^2}+X(x)Z(z)\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+X(x)Y(y)\frac{d^2Z(z)}{dz^2}\right)=E\,X(x)Y(y)Z(z)$$

La oss dele likninga på $X(x)Y(y)Z(z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}=E$$

Sjå på venstresida: Her er 1. ledd openbart uavhengig av y og z, 2. ledd er uavhengig av x og z, og 3. ledd er uavhengig av x og y.
Høgresida E er ein konstant, dvs. uavhengig av x, y, og z. Dermed må venstresida også vere uavhengig av x, y, og z. Dermed må 1. leddet på venstresida også vere uavhengig av x, dvs. ein konstant, vi kallar denne konstanten E_X. Tilsvarande for 2. og 3. ledd på venstresida, som må vere konstantar E_Y og E_Z

Får då dei 3 likningane

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = E_X X(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} = E_Y Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = E_Z Z(z)$$

med tilhøyrande grensebetingelsar

$$X(0) = X(L) = 0$$

$$Y(0) = Y(L) = 0$$

$$Z(0) = Z(L) = 0$$

Merk: Vi har redusert problemet til 3 identiske delproblem, 1 for kvar retning. Vidare: Delproblemet er identisk med partikkel-i-1D-boks-problemet som vi har løyst tidlegare!

Dette gir (inni boksen)

$$X_{n_X}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_X \pi x}{L}$$

$$Y_{n_Y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_Y \pi y}{L}$$

$$Z_{n_Z}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_Z \pi z}{L}$$

der n_X, n_Y, og n_Z er (uavhengige!) positive heiltal

Dermed blir

$$\psi_{n_X, n_Y, n_Z}(x, y, z) = X_{n_X}(x) Y_{n_Y}(y) Z_{n_Z}(z)$$

Løysingane av TUSL (og dermed også dei stasjonære tilstandene) avheng altså av eit sett av 3 kvantetal (n_X,n_Y,n_Z).

Energien E til tilstanden blir summen av energiane E_X, E_Y, og E_Z :

$$E_{n_X, n_Y, n_Z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(n_X^2 + n_Y^2 + n_Z^2)$$

energivå (diskrete)

Degenerasjon

Når fleire stasjonære tilstander har same energi, seier vi at energinivået er degenerert og at systemet har degenerasjon. La oss illustrere dette for ein partikkel i ein 3D boks, der energien til ein tilstand (n_X,n_Y,n_Z) er

$$E_{n_X,n_Y,n_Z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_X^2 + n_Y^2 + n_Z^2)$$

Tilstanden (1,1,1) har lågast energi. Sidan ingen andre tilstander har same energi, er dette energinivået ikkje degenerert.

Den nest lågaste energien får ein ved å la eitt av kvantetala vere 2, og dei to andre vere 1. Det er 3 tilstander som har denne energien: (2,1,1), (1,2,1), og (1,1,2). Dette energinivået er altså degenerert.

Det neste energinivået svarer til at to kvantetal er 2 og eitt kvantetal er 1.
Det er 3 tilstander som har denne energien: (1,2,2), (2,1,2), og (2,2,1).
Dette energinivået er altså også degenerert.

Det er også det neste energinivået, som svarer til at eitt kvantetal er 3 og dei to andre er 1. Tre tilstander har denne energien: (3,1,1), (1,3,1), og (1,1,3). Desse tilstandene har altså lågare energi enn (2,2,2)-tilstanden, som gir det neste energinivået, som ikkje er degenerert. Og slik kan ein halde fram …

Degenerasjonen er ein konsekvens av ein symmetri: Bokslengda er den same (L) i alle 3 retningar. For å forstå dette betre ser vi no på ein boks med lengder L_X, L_Y, og L_Z i dei tre retningane. Ved å bruke same analysen som før finn ein at energinivåa er

$$E_{n_X,n_Y,n_Z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_X^2}{L_X^2} + \frac{n_Y^2}{L_Y^2} + \frac{n_Z^2}{L_Z^2}\right)$$

Dersom alle dei tre lengdene er forskjellige er energinivåa ikkje degenererte. F.eks. vil tilstandene (2,1,1), (1,2,1), og (1,1,2) ha forskjellig energi. Ein kan altså "fjerne" degenerasjon ved å fjerne symmetrien i systemet. Merk at dersom ein kun delvis fjernar symmetrien, f.eks. ved at L_X og L_Y er like, mens L_Z er forskjellig, vil degenerasjonen også kun delvis fjernast. F.eks. vil tilstandene (2,1,1) og (1,2,1) då ha same energi, mens (1,1,2) har forskjellig energi (dette følgjer igjen frå uttrykket for energien over).

Det neste systemet vi skal sjå på er elektronet i eit hydrogenatom. Vi skal igjen sjå at energinivåa er degenererte. Dette skuldast (bl.a.) at den potensielle energien er kulesymmetrisk.