

## Curs 11

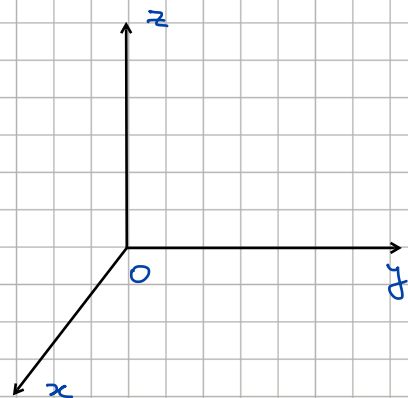
### Probleme tridimensionale

- dorim rezolvarea ecuației lui Schrödinger pentru particule fără spin în potențiale tridimensionale.

### Probleme 3D în coordonate carteziene

În sistem.  $(Oxyz)$ , funcția de undă în general este  $\Psi(x, y, z, t)$

Ec. Schrödinger ptr un potențial general  $V(x, y, z)$  este:



$$i\hbar\partial_t \Psi(x, y, z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z, t)$$

$$\nabla^2 = \text{Laplacian} = \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2.$$

Dacă  $V(x, y, z)$  nu depinde timp, putem considera stările staționare:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \cdot e^{-iEt/\hbar}.$$

unde  $\Psi(x, y, z)$  satisface ec. Schrödinger independentă de timp.

$$H \cdot \Psi(x, y, z) = E \cdot \Psi(x, y, z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Există situații în care problema 3D poate fi redusă la rezolvarea ec. Schrödinger ptr mișcarea unidimensională

Ex:

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \quad : \text{potential separabil}$$

Operatorial:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) &= \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_x(x) \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 + V_y(y) \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + V_z(z) \right) \end{aligned}$$

sau

$$H(x, y, z) = H_x + H_y + H_z$$

unde  $H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_x(x)$  și expresii analoge ptr  $H_y, H_z$ .

$$(H_x + H_y + H_z) \Psi(x, y, z) = E \cdot \Psi(x, y, z)$$

Rezolvarea ec. diferențiale cu variabile separabile se face folosind factorizând

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

$$(H_x + H_y + H_z) \cdot X(x) Y(y) Z(z) = E X(x) Y(y) Z(z)$$

$$\begin{aligned} (H_x \cdot X(x)) \cdot Y(z) Z(z) + (H_y \cdot Y(y)) \cdot X(x) Z(z) + (H_z \cdot Z(z)) \cdot X(x) Y(y) \\ = E X(x) Y(y) Z(z) \quad | : X \cdot Y \cdot Z \end{aligned}$$

$$\frac{\hat{H}_x \cdot X(x)}{X(x)} + \frac{\hat{H}_y Y(y)}{Y(y)} + \frac{\hat{H}_z Z(z)}{Z(z)} = E$$

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \cdot X(x) + V_x(x) \cdot X(x)}{X(x)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 Y + V_y Y}{Y(y)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 Z + V_z Z}{Z(z)} = E$$

" expresia depinde doar de x
" expresia depinde doar de y
" expresia depinde doar de z

=> fiecare termen este constant  $E = E_x + E_y + E_z$ .

Esența metodei de separare a variabilelor constă în reducerea unei probleme 3D (tridimensionale) la un set de probleme 1D (unidimensionale)

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 X(x) + V_x(x) \cdot X(x)}{X(x)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 Y + V_y Y}{Y(y)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 Z + V_z Z}{Z(z)} = E_x + E_y + E_z$$

ec. 3D

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 X(x) + V_x(x) \cdot X(x)}{X(x)} &= E_x & | & \cdot X(x) \\ \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 Y + V_y Y}{Y(y)} &= E_y & | & Y(y) \\ \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 Z + V_z Z}{Z(z)} &= E_z & | & Z(z) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 X(x) + V_x(x) \cdot X(x) &= E_x \cdot X(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 Y + V_y Y(y) &= E_y \cdot Y(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 Z + V_z Z(z) &= E_z \cdot Z(z) \end{aligned} \right.$$

un set de 3 ecuații Schrödinger pentru probleme 1D.

Particula liberă :  $V_x = V_y = V_z = 0$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 X = E_x \cdot X \quad | \cdot \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\partial_x^2 X(x) + \frac{2mE_x}{\hbar^2} X(x) = 0$$

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{k_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{i k_x \cdot x}$$

$$\psi_{\vec{k}}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot e^{i k_x \cdot x} \cdot e^{i k_y \cdot y} \cdot e^{i k_z \cdot z}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  - vectorul de undă.

Energia totală:

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \text{const.}$$

Fct. de undă dependentă de  $t$ :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

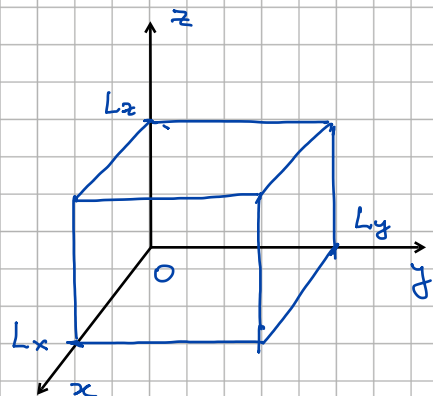
↳ undă plană 3D.

Fct. de undă sunt ortonormate:

$$\langle \psi_{\vec{k}'}(t) | \psi_{\vec{k}}(t) \rangle = \int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}, t) \cdot \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) d\vec{r} = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$$

Groapa de potențial,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0; & 0 < x < L_x; \quad 0 < y < L_y \\ & 0 < z < L_z \\ \infty & \text{în afara cutiei} \end{cases}$$



$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

$$V_x(x) = \begin{cases} 0; & 0 < x < L_x \\ \infty; & \text{altfel} \end{cases} \quad \text{și la fel } V_y \text{ și } V_z$$

Ptr  $0 < x < L_x$ :

$$\begin{cases} X(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin \frac{n_x \cdot \pi \cdot x}{L_x} \\ E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2 \cdot n_x^2}{2m L_x^2} \end{cases} \quad n_x = 1, 2, 3, \dots$$

Soluțiile după direcțiile  $y$ ,  $z$  se obțin  $X \rightarrow Y \rightarrow Z$   
 $x \rightarrow y \rightarrow z$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$   
(toate independente)

↳ funcția de undă și nivelele energetice în interiorul unei cutii. Energia particulei depinde de un set de 3 numere cuantice

Ptr. un potential cubic  $\Rightarrow L_x = L_y = L_z = L$ . :  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}$

| $(n_x, n_y, n_z)$ | $E_{n_x, n_y, n_z} / E_1$ | $g$ (degenerate) |
|-------------------|---------------------------|------------------|
| (1, 1, 1)         | 3                         | 1                |
| (1, 1, 2)         | 6                         | 3                |
| (1, 2, 1)         | 6                         | 3                |
| (2, 1, 1)         | 6                         | 3                |
| 1   2   2         |                           |                  |
| 2   1   2         |                           |                  |
| :                 |                           |                  |

Degenerarea unui nivel energetic reprezintă nr. posibil de stări cu aceeași valoare a energiei.

Ptr stări degenerate,  $fct$  de undă sunt diferite dar energiile asociate sunt identice.

Ptr potențial cubic:  $E_{(1,1,1)}$  este un nivel nedegenerat ( $g=1$ ) iar prima stare excitată  $E_2 = 6E_1$  este triplu degenerată.

Oscilatorul armonic 3D (cazul anizotrop)

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 \cdot x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2$$

∥ folosind formalismul general de separare a variabilelor

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 X(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 \cdot x^2 X(x) = E_x \cdot X(x)$$

∥ Energia totală a oscilatorului armonic este:

$$\begin{aligned} E_{n_x, n_y, n_z} &= E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \\ &= \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z \\ & \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

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

cazul izotrop ( $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ )

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega$$

Starea f.d.m.:  $E_{000} = \frac{3}{2} \hbar \omega$  - stare nedegenerată.

$E_{100} = E_{010} = E_{001} = \frac{5}{2} \hbar \omega$  - prima stare excitată este triplu degenerată.

$$E_{002} = E_{020} = E_{200} = E_{110} = E_{011} = E_{101} = \frac{7}{2} \hbar \omega \quad ; \quad g = 6$$

In general ptr o stare cu  $n$ -cuante :

$$\text{ptr } n_x + n_y + n_z = n \quad \Rightarrow \quad g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

$$\begin{aligned} g_n &= \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = (n+1) \cdot \sum_{n_x=0}^n 1 - \sum_{n_x=0}^n n_x \\ &= (n+1)^2 - \frac{1}{2}n(n+1) \\ &= (n+1) \left( n+1 - \frac{1}{2}n \right) \end{aligned}$$

$$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$