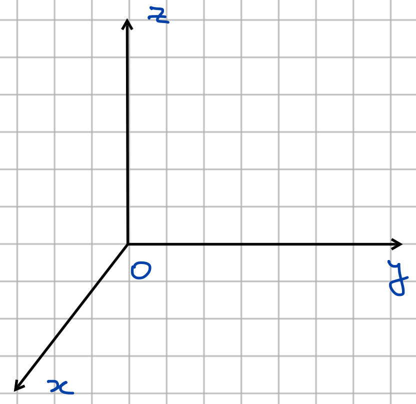
Curs 11

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.

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

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

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

Ex:

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

Operatorial:

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

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

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_x(x)\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_y^2 + V_y(y)\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_z^2 + V_z(z)\right)$$

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 analoage pentru 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

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

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

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

$$= E\,X(x)\,Y(y)\,Z(z) \quad \Big| : X\cdot Y\cdot Z$$

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

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

$\Rightarrow$ 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)

ec. 3D

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

$\Downarrow$

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

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

un set de 3 ecuații Schrödinger pentru probleme 1D.

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

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

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

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

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

$$\Downarrow$$

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

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

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

Energia totală:

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

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

Fct. de undă dependentă de t:

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

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

$$\Downarrow$$

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

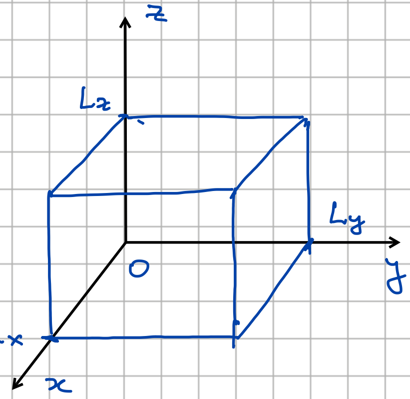
↳ unda plană 3D.

Fcț de undă sunt ortonormate:

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

Groapa de potențial

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



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

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

Ptr $0 < x < L_x$:

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \\ E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \\ & n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3 \dots \\ & \text{(toate independente)} \end{aligned}}$$

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

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

(n_x, n_y, n_z)	$E_{n_x, n_y, n_z} / E_1$	g (degenerare)
$(1, 1, 1)$	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, f-ții 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.

<u>Oscilatorul armonic 3D</u> (cazul anizotrop)

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

$\Downarrow$ folosind formalismul general de separare a variabilelor

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

$\Downarrow$

Energia totală a oscilatorului armonic este:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$$

$$= \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z$$

$$n_x, n_y, n_z = 0,1,2,\ldots$$

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

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

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