Συστήματα σε 3 Διαστάσεις

Δομή Διάλεξης

Βασικές γενικεύσεις: Κυματοσυνάρτηση-Διατήρηση Πιθανότητας σε 3 διαστάσεις

Χαμιλτονιανή – Χρονική Εξέλιξη σε 3 διαστάσεις

Παράδειγμα: Κουτί απείρου βάθους σε 3 διαστάσεις

Σύνοψη – Άσκηση (Αρμονικός Ταλαντωτής)

Βασικές Γενικεύσεις

Κανονικοποίηση κυματοσυνάρτησης σε μια διάσταση:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, dx = 1$$

Σε 3 διαστάσεις:

$$P(x,y,z,t) = |\psi(x,y,z,t)|^2.$$

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

Διατήρηση πιθανότητας σε μια διάσταση:

(αφαίρεση εξ. Schrodinger - συζυγή)

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0,$$

+2a

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$$

$$\xrightarrow[|x| \to \infty]{\psi \to 0}$$

+2b

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, dx = 0.$$

η κανονικοποίηση διατηρείται!

Διατήρηση Πιθανότητας

Διατήρηση πιθανότητας σε μια διάσταση:

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0,$$

$$j=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$\xrightarrow[|x|\to\infty]{\psi\to 0}\quad \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx=0.$$

η κανονικοποίηση διατηρείται!

Σε 3 διαστάσεις:

(αφαίρεση ψ* επί εξ. Schrodinger – ψ επί συζυγή)

+2c

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}+\frac{\partial j_x}{\partial x}+\frac{\partial j_y}{\partial y}+\frac{\partial j_z}{\partial z}=0.$$

$$j_x=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$j_y=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial y}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)$$

$$\xrightarrow[|x|\to\infty]{\psi\to 0}\quad \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,y,z,t)|^2\,dx\,dy\,dz=0.$$

+2d

η κανονικοποίηση διατηρείται!

+2c

$$i\cancel{\hbar}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\,\psi$$

$$-i\cancel{\hbar}\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2m}\nabla^2\psi^* + V\,\psi^*$$

$$i\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = -\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\hbar}{2m}\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right] \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

Σχέσεις Μετάθεσης

Συνιστώσες τελεστών ορμής:

$$p_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$
$$p_y \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},$$
$$p_z \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Σχέσεις Μετάθεσης:

$$[x_i, x_j] = 0,$$
$$[p_i, p_j] = 0,$$
$$[x_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}.$$

Δεν υπάρχει σχέση αβεβαιότητας μεταξύ x_i και p_j ($j \neq i$)

Χρονική Εξέλιξη σε 3D

Σε 1 διάσταση:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \qquad H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x,t),$$

Σε 3 διαστάσεις:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z,t).$$

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi, \\ p_x &\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \\ p_y &\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \\ p_z &\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}\right\} \longrightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi. \qquad \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

+2e

(αφαίρεση ψ* επί εξ. Schrodinger – ψ επί συζυγή)

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} = 0.$$

Χρονική Εξέλιξη σε 3D

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi,$$

$$p_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

$$p_y \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},$$

$$p_z \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

$$\longrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi. \qquad \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

(αφαίρεση ψ* επί εξ. Schrodinger – ψ επί συζυγή)

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} = 0.$$

Για ιδιοκαταστάσεις H έχουμε:

$$H\psi = E\psi.$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi,$$

$$H\psi = E\psi.$$

$$\longrightarrow \quad \psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\,e^{-iEt/\hbar},$$

όπου

$$\nabla^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi,$$

και V ανεξάρτητο του χρόνου

Σωμάτιο σε 3D κουτί

Έστω 3D κυβικό κουτί με διάσταση α και δυναμικό απείρου βάθους

Εξίσωση Schrodinger:

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

Δοκιμαστική λύση (χωριζόμενες μεταβλητές):

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

Οριακές Συνθήκες:

$$X(0)=X(a)=0,\; Y(0)=Y(a)=0,$$
$$Z(0)=Z(a)=0.$$

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi=-\frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi,\\ &\psi(x,y,z)=X(x)\,Y(y)\,Z(z).\end{aligned}\right\}\longrightarrow\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}=-\frac{2m}{\hbar^2}E,$$

+2f

Σωμάτιο σε 3D κουτί

x, y, z ανεξάρτητες μεταβλητές, άρα κάθε όρος ισούται με σταθερά

$$\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}=-\frac{2m}{\hbar^2}E, \longrightarrow \begin{aligned}\frac{X''}{X} &= -k_x^2,\\ \frac{Y''}{Y} &= -k_y^2,\\ \frac{Z''}{Z} &= -k_z^2,\end{aligned}$$

Αρνητικές Σταθερές (από οριακές συνθήκες)

$$\left.\begin{aligned}\frac{X''}{X} &= -k_x^2,\\ \frac{Y''}{Y} &= -k_y^2,\\ \frac{Z''}{Z} &= -k_z^2,\end{aligned}\right\} \longrightarrow \left\{\begin{aligned}X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_x x),\\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_y y),\\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_z z),\end{aligned}\right.$$

+2g

όπου

θετικοί ακέραιοι

$$\begin{aligned}k_x &= \frac{l_x \pi}{a},\\ k_y &= \frac{l_y \pi}{a},\\ k_z &= \frac{l_z \pi}{a}.\end{aligned}$$

από οριακές συνθήκες

$$X(0)=X(a)=0,\ Y(0)=Y(a)=0,$$
$$Z(0)=Z(a)=0.$$

Σωμάτιο σε 3D κουτί

Ενεργειακό φάσμα:

$$\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} = -\frac{2m}{\hbar^2} E,$$

$$\frac{X''}{X} = -k_x^2,$$

$$\frac{Y''}{Y} = -k_y^2,$$

$$\frac{Z''}{Z} = -k_z^2,$$

$$k_x = \frac{l_x \pi}{a},$$

$$k_y = \frac{l_y \pi}{a},$$

$$k_z = \frac{l_z \pi}{a}.$$

$$E = \frac{l^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}.$$

όπου

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2.$$

Σύνοψη

Η εξίσωση του Schrodinger σε 3D προκύπτει με αντικατάσταση της χωρικής δεύτερης παραγώγου ως προς x από την Λαπλασιανή ∇^2 .

Η διαφορική εξίσωση με μερικές παραγώγους που προκύπτει μπορεί να λυθεί με την μέθοδο του χωρισμού μεταβλητών όταν το δυναμικό έχει την κατάλληλη συμμετρία.

Άσκηση

Λύστε το πρόβλημα του 3D ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή (βρείτε ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές)

Δυναμικό:

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

Hamiltonian:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}^2 \qquad H = H_x + H_y + H_z, \qquad \begin{cases} H_x = \dfrac{p_x^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}x^2 \\ H_y = \dfrac{p_y^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}y^2 \\ H_z = \dfrac{p_z^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}z^2 \end{cases}$$

Δοκιμαστική λύση (χωρισμός μεταβλητών):

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z),$$

Για την x συνιστώσα:

$$H_x\psi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi_1$$

όμοια για τις y και z.

+2g

Για την ενέργεια:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$