ΜΑΘΗΜΑ 4°

Μέθοδος χωρισμού μεταβλητών

Η εξίσωση Schrödinger διασπάται σε 1-διάστατες εξισώσεις όταν

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

$$H\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow (H_x + H_y + H_z)\psi = E\psi$$

με

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

και παρομοίως για τις H_y, H_z. Αν η ψ αντικατασταθεί από το **γινόμενο**

$$\psi = \psi_x(x)\,\psi_y(y)\,\psi_z(z)$$

προκύπτουν οι εξισώσεις 1-διάστασης

$$H_x\psi_x(x) = E_x\psi_x(x)$$
$$H_y\psi_y(y) = E_y\psi_y(y)$$
$$H_z\psi_z(z) = E_z\psi_z(z)$$

με την ενέργεια από το **άθροισμα**

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Άσκηση:

Η Χαμιλτονιανή του 3-διάστατου ισοτροπικού $(\omega_1=\omega_2=\omega_3=\omega)$ αρμονικού ταλαντωτή μάζας m και κυκλικής συχνότητας ω έχει την μορφή

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2+z^2).$$

(1) Αφού εκφράσετε την H ως το άθροισμα τριών παρόμοιων Χαμιλτονιανών H_x, H_y, H_z για 1-διάστατους ταλαντωτές να δείξετε ότι η ενέργεια ισούται με $\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, $n=$ μηδέν ή θετικός ακέραιος.

(2) Να δείξετε ότι οι εκφυλισμοί των τριών χαμηλότερων ενεργειακών σταθμών είναι 1, 3, 6 και ο εκφυλισμός της στάθμης n είναι $(n+1)(n+2)/2$.

(3) Να βρείτε την ισοτιμία των καταστάσεων στην στάθμη n.

Λύση:

$$H=H_x+H_y+H_z$$

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

και παρομοίως για H_y, H_z. Οι τελεστές H_x, H_y, H_z διαφέρουν μόνο στο δείκτη συντεταγμένων. Αν

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

όπου η $\psi_1(x)$ είναι λύση της

$$H_x \psi_1(x) = E_1 \psi_1(x)$$

και αντίστοιχα για τις $\psi_2(y)$, $\psi_3(z)$.

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

με E το άθροισμα

$$E = E_1 + E_2 + E_3$$

επειδή η H_x δρα μόνο στην $\psi_1(x)$ θεωρώντας το $\psi_2(y)$ $\psi_3(z)$ ως σταθερές

$$H_x \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = E_1 \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

και αντίστοιχα για τις H_y, H_z. Όμως από την γνωστή λύση του 1-διάστατου αρμονικού ταλαντωτή

$$E_1 = \left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad , \quad n_1 = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\boxed{E = \left(n + \tfrac{3}{2}\right)\hbar\omega} \quad , \quad n = n_1 + n_2 + n_3 = 0, 1, 2, \ldots$$

(2) - - - -

$n=2$: $(2,0,0), (0,2,0), (0,0,2), (0,1,1), (1,0,1), (1,1,0)$

$n=1$: $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$

$n=0$: $(0,0,0)$

τρία μόνο χρειάζονται π.χ. n, n_x, n_y

αφού οι $\psi(x,y,z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$ καθορίζονται από την τριάδα (n_1, n_2, n_3). Για να βρούμε τον εκφυλισμό της $E_n = (n+\frac{3}{2})\hbar\omega$

Όταν n_1 = σταθ, $n_2 = 0, 1, \ldots, n-n_1$ (μία από αυτές) και το άθροισμα $n = n_1 + n_2 + n_3$ για δοσμένα n, n_1 μπορεί να ληφθεί με $n - n_1 + 1$ τρόπους

$$\text{εκφ} = \sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$ Πχ. $n=0$: 1, $n=1$: 3, $n=2$: 6, ...

Α ΑΤ

$n = n_1 + n_2 + n_3 =$ άρτιος ↗ όλλοι άρτιοι $+++$ ⇒ άρτια ισοτιμία
↘ 2 άρτιοι + 1 περιττός $++-$

$n = n_1 + n_2 + n_3 =$ περιττός ⇒ περιττή ισοτιμία.

Η ισοτιμία εξαρτάται από την αρχή των συντεταγμένων
(πηγάδι στο $[0,a]$ δεν έχει καθορισμένη ισοτιμία)

πηγάδι άρτιος → περιττή
περιττός → άρτια

$n = n_x + n_y + n_z =$ άρτιος ↗ 3 άρτιοι ⇒ περιττή ισοτιμία
↘ 2 άρτιοι + 1 περιττός

$n = n_x + n_y + n_z =$ περιττός ⇒ άρτια ισοτιμία.