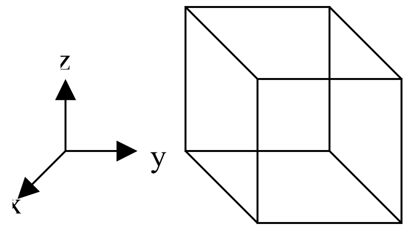
חלקיק בקופסא תלת מימדית:

$0 \le x \le a$

$0 \le y \le b$

$0 \le z \le c$



משוואת שרדינגר הכללית הינה $\hat{H}\Psi = E\Psi$, כאשר במקרה הנ"ל פונקציית הגל תלויה בשלושה משתנים, בשלוש קואורדינאטות שונות, $\Psi(x,y,z)$. המילטוניאן גם כן תלוי בשלושת הקואורדינאטות:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\hat{\partial}^2}{\partial x^2} + \frac{\hat{\partial}^2}{\partial y^2} + \frac{\hat{\partial}^2}{\partial z^2}\right)$$

ניתן לרשום ביטוי זה בצורה מקוצרת: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2$, כאשר $\hat{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

אם כך ניתן לרשום את ההמילטוניאן כסכום של המילטוניאנים בלתי תלויים:

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

אם קיים המילטוניאן שניתן לרשום אותו כסכום של המילטוניאנים בלתי תלויים, הרי שפונקציית הגל תהיה מכפלה של פונקציות בלתי תלויות: $\Psi = \mathrm{X}(x)\mathrm{Y}(y)\mathrm{Z}(z)$. לעיקרון זה נקרא <u>הפרדת משתנים</u>. נציב פונקציית גל זו במשוואת שרדינגר:

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

נחלק את שני אגפי המשוואה ב- Ψ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{X}''(x)}{\mathrm{X}(x)} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{Y}''(y)}{\mathrm{Y}(y)} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{Z}''(z)}{\mathrm{Z}(z)} = E$$

קיבלנו סכום של שלושה איברים שכל אחד תלוי במשתנה אחר. על מנת ששוויון זה יתקיים כל איבר צריך להיות שווה לקבוע. נסמן את הקבוע של כל אחד מהאיברים ב- E_x, E_y, E_z עבור האיבר הראשון, השני, והשלישי בהתאמה. נרשום כל משוואה התלויה במשתנה יחיד בנפרד:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}X''(x)=E_xX(x) \qquad 0\le x\le a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Y''(y)=E_yY(y) \qquad 0\le y\le b$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Z''(z)=E_zZ(z) \qquad 0\le z\le c$$

למעשה קיבלנו 3 משוואות של חלקיק בקופסא חד מימדית ולכן האנרגיה הכוללת תהיה סכום של שלוש האנרגיות $E_x+E_y+E_z=E$:

$$X(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right) \qquad E_{n_x}=\frac{h^2n_x^2}{8ma^2}$$

$$Y(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n_y\pi y}{b}\right) \qquad E_{n_y}=\frac{h^2n_y^2}{8mb^2}$$

$$Z(z)=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{n_z\pi z}{c}\right) \qquad E_{n_z}=\frac{h^2n_z^2}{8mc^2}$$

ומכאן שפונקציית הגל שלנו היא:

$$\Psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{b}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{c}\right)$$

והאנרגיה הכללית של המערכת היא:

$$E_{n_xn_yn_z}=\frac{h^2}{8m}\left[\left(\frac{n_x}{a}\right)^2+\left(\frac{n_y}{b}\right)^2+\left(\frac{n_z}{c}\right)^2\right]$$

לכל דרגת חופש יש מספר קוונטי אחד!

האנרגיה הכי נמוכה, אנרגיית מצב היסוד היא כאשר $n_x=n_y=n_z=1$, זו תקרא אנרגיית האפס וערכה:

$$E_{1,1,1}=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

נבחן את המקרה בו $a=b=c\equiv a$:

$$E_{n_xn_yn_z}=\frac{h^2}{8ma^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)$$

לעיתים עבור מצבים שונים של המערכת אנו מקבלים את אותו ערך אנרגיה. לתופעה זו קוראים **ניוון.**
ניתן להפריד בין שני מקרים של ניוון:

1. ניוון לא מקרי, זהו למעשה מספר המצבים באנרגיה נתונה. להלן טבלה להמחשה:

n_z	n_y	n_x	מספר המצבים (ניוון)	אנרגיה $\frac{h^2}{8ma^2}$
1	1	1	1	3
1 1 2	1 2 1	2 1 1	3	6
1 2 2	2 1 2	2 2 1	3	9
1 1 3	1 3 1	3 1 1	3	11
2	2	2	1	12

כשהאנרגיה עולה בד"כ הניוון גדל.

2. ניוון מקרי- ניוון שנוצר באופן מקרי לגמרי בניגוד לקודמים. לדוגמה המצב בו המספרים הקוונטים הם 5,5,2 זהה באנרגיה למצב בו המספרים הקוונטיים הם4,4,1 וערך האנרגיה הוא 33.

נחזור ונדגיש כי כאשר יש בפנינו בעיה רב מימדית ננסה ונראה אם ניתן לתאר את המערכת ע"י המילטוניאן שניתן לפרק את ההמילטוניאן לסכום של המולטוניאנים התלויים בפחות משתנים, ופונקציית גל שהיא מכפלה של פונקציות , ואז האנרגיה מתקבלת כסכום של אנרגיות של כל דרגת חופש.

אופרטור האנרגיה הוא אופרטור לינארי , ומשוואת שרדינגר היא משוואת ערך עצמי ליניארית וכן אנו מחפשים את הפתרונות הבלתי תלויים לינארית.

נחשב כעת את עיקרון אי הוודאות עבור מודל זה כלומר מהם $\Delta z\Delta P_z$, $\Delta y\Delta P_y$, $\Delta x\Delta P_x$ (כפי שעשינו עבור חלקיק בקופסא חד מימדית). נניח כי $\Delta z = c$, $\Delta y = b$, $\Delta x = a$ ונחשב את Δp מהשונות: $\Delta p = \left(<\hat{p}^2> - <\hat{p}>^2\right)^{1/2}$. נחשב תחילה את ערך התנע הממוצע עבור ציר x :

$$<\hat{p}_x> = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\right]dx = i\hbar\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\frac{n_x\pi}{a}dx$$

$$<\hat{p}_x> = \frac{i\hbar n_x\pi}{a^2}\int_0^a \sin\left(\frac{2n_x\pi x}{a}\right)dx = -\frac{i\hbar}{a^2}n_x\pi\frac{a}{2n\pi}\cos\left(\frac{2n_x\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a = 0$$

נחשב את הערך הממוצע של התנע בריבוע:

$$<P_x^2> = \int \Psi^*(x,y,z)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi(x,y,z)d\tau$$

נציב את פונקציית הגל שלנו:

$$<P_x^2> = \int_0^a dx\int_0^b dy\int_0^c dz \mathrm{X}(x)\mathrm{Y}(y)\mathrm{Z}(z)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathrm{X}(x)\mathrm{Y}(y)\mathrm{Z}(z)$$

$$= \int_0^a \mathrm{X}(x)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathrm{X}(x)dx\int_0^b \mathrm{Y}(y)\mathrm{Y}(y)dy\int_0^c \mathrm{Z}(z)\mathrm{Z}(z)dz = -\hbar\int_0^a \mathrm{X}(x)\mathrm{X}''(x)dx$$

מכיוון ופונקציות הגל של מודל זה כולן מנורמלות, האיברים $\int_0^c \mathrm{Z}(z)\mathrm{Z}(z)dz$, $\int_0^b \mathrm{Y}(y)\mathrm{Y}(y)dy$ שוים לאחד. נשאר לחשב את האינטגרל:

$$<P_x^2> = \int_0^a \mathrm{X}(x)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathrm{X}(x)dx$$

ננצל את העובדה ש- $<\hat{p}^2> = 2mE_n$ ולכן:

$$<\hat{p}^2> = \frac{h^2n^2}{4a^2} \rightarrow \Delta p = \left(\frac{h^2n^2}{4a^2} - 0\right)^{1/2} = \frac{hn}{2a} \rightarrow \Delta x\Delta P = \frac{hn}{2} = \pi\hbar n$$

מכאן ניתן לראות כי החישובים של שלוש המשוואות הראשונות הם כולם כשל חישובים של חד מימד.

$$\Delta x\Delta P_x = \frac{n_x h}{2} \quad , \quad \Delta y\Delta P_y = \frac{n_y h}{2} \quad , \quad \Delta z\Delta P_z = \frac{n_z h}{2}$$

אם נרצה לחשב את אי הוודאות באלמנטים מעורבים לדוגמת $\Delta x\Delta P_y$ יהיה צורך להשתמש בתאוריה סטטיסטית רב מימדית ולא חד מימדית כפי שעשינו עד עכשיו. במקרה הפרטי שלנו אין קורלציה בין המימדים ולכן אלמנטים מעורבים מסוג זה שוים לאפס.

נרצה להוכיח טענה זו, כלומר נרצה להוכיח כי: $\quad \Rightarrow \Delta A\Delta B = 0 \qquad [A,B]=0$

__טענות:__

1.אם $[A,B]=0$ וגם $A\Psi=a\Psi$ אזי $\Phi=B\Psi$ גם פונקציה עצמית של A עם אותו ערך עצמי a.

$$A\Psi = a\Psi /\cdot B_{left} \rightarrow BA\Psi = Ba\Psi = aB\Psi \rightarrow AB\Psi = aB\Psi$$
$$\Phi = B\Psi \rightarrow A\Phi = a\Phi$$

2. אם $[A,B]=0$ ואם $A\Psi_1 = a\Psi_1$ וגם $A\Psi_2 = a\Psi_2$ אז $\int \Psi_1^* B\Psi_2 d\tau = 0$

$$AB - BA = 0 \rightarrow \int \Psi_1^*(AB-BA)\Psi_2 d\tau = 0$$
$$\int \Psi_1^*(AB-BA)\Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^*(a_1B - Ba_1)\Psi_2 d\tau = (a_1-a_2)\int \Psi_1^* B\Psi_2 d\tau = 0$$

טענה זו נכונה אם ורק אם שני הערכים העצמיים שונים זה מזה.

3. אם $[A,B]=0$ אז ניתן למצוא בסיס בו גם A וגם B אלכסוניים. כלומר יש פונקציות עצמיות של A שהן פונקציות עצמיות של B. כלומר:

אם $\quad A\varphi_n = a_n\varphi_n$

מתקיים גם $\quad B\varphi_n = b_n\varphi_n$

צריך להראות כי $\quad n \neq m \qquad <\varphi_n / B / \varphi_m >= 0$

$$\int \varphi_n^* B\varphi_m d\tau = 0 \qquad n \neq m$$
$$\int \varphi_m^* A\varphi_n d\tau = 0 \qquad n \neq m$$
$$\int \varphi_m^* A\varphi_n d\tau = a_n \int \varphi_m\varphi_n d\tau = 0$$

$$A_{mn} = \int \varphi_m^* A\varphi_n d\tau = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & . & & \ddots \\ . & & . & 0 \\ 0 & .. & & a_n \end{pmatrix} \rightarrow B_{mn} = \int \varphi_m^* B\varphi_n d\tau = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & . & & \ddots \\ . & & . & 0 \\ 0 & .. & & b_n \end{pmatrix}$$

לשני אופרטורים חילופיים יש אותם פונקציות עצמיות.

אם $[A,B]=0$ קיים בסיס של פונקציות עצמיות גם של A וגם של B.

אם ניקח מערכת במצב עצמי φ_n וזהו מצב עצמי של A וגם של B אז התוצאה **תמיד** תהיה a_n,b_n בלי אי וודאות. אם ניקח מערכת במצב עצמי φ_n וזהו מצב עצמי של A אך לא של B , עבור A נקבל תמיד את a_n ועבור B נקבל ערכים עצמיים שונים ויש לנו אי וודאות.

ולכן כאשר שואלים אותנו מה ערך המכפלה $\Delta x \Delta P_y$ נבדוק את חילופיות האופרטורים :

$$\left[x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right]=x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)+i\hbar\frac{\partial}{\partial y}x=0$$

אם האופרטורים חילופיים , אז אין ביניהם אי ודאות.