Prosti kvantni delec v treh dimenzijah

Sedaj moramo rešiti Schrödingerjevo enačbo, ki vsebuje vse tri krajevne koordinate.

$$\hat{\mathrm{H}}\Psi(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z},\mathrm{t}) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\mathrm{x,y,z,t})}{\partial\mathrm{t}}.$$

Najprej rešimo stacionarno verzijo

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \mathrm{E}\psi(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}).$$

Hamiltonov operator ima za tridimenzionalno gibanje naslednjo obliko

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dy}^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dz}^2}\right)+\mathrm{V(x,y,z)}.$$

Potencial delca je konstanten in enak vrednosti 0, tako da se stacionarna Schrödingerjeva enačba poenostavi na

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

Ko celo enačbo pomnožimo z (-2m) in delimo s $\hbar^2$ in uvedemo novo spremenljivko $\frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2} = \mathrm{k}^2$, dobimo

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2}+\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dy}^2}+\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dz}^2}+\mathrm{k}^2\psi=0.$$

Pri reševanju si pomagamo s postopkom ločitve spremenljivk, uporabimo nastavek

$$\psi(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \mathrm{X(x)Y(z)Z(z)},$$

ki ga vstavimo v Schrödingerjevo enačbo. Dobimo

$$YZ\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{X}}{\mathrm{dx}^2}+\mathrm{XZ}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Y}}{\mathrm{dy}^2}+\mathrm{XY}\frac{\mathrm{d}^2 Z}{\mathrm{dz}^2}+\mathrm{k}^2\mathrm{XYZ}=0.$$

Celo enačbo sedaj delimo z $\mathrm{X(x)Y(z)Z(z)}$ in sedaj imamo

$$\frac{1}{X}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{X}}{\mathrm{dx}^2}+\frac{1}{Y}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Y}}{\mathrm{dy}^2}+\frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}^2 Z}{\mathrm{dz}^2}+\mathrm{k}^2=0.$$

Člen $\frac{1}{X}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{X}}{\mathrm{dx}^2}$ je odvisen samo od koordinate x, $\frac{1}{Y}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Y}}{\mathrm{dy}^2}$ od y in $\frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}^2 Z}{\mathrm{dz}^2}$ od z. Njihova vsota je lahko enaka nič samo, ko so vsi trije neodvisni od koordinat, se pravi konstantni.

$$\frac{1}{X}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{X}}{\mathrm{dx}^2} = k_x^2$$

$$\frac{1}{Y}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Y}}{\mathrm{dy}^2} = k_y^2$$

$$\frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Z}}{\mathrm{dz}^2} = k_z^2$$

Velja še $\mathrm{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. Rešitve teh enačb so naslednje funkcije

$$\mathrm{X(x)} = \mathrm{Ae}^{\mathrm{ik}_x\mathrm{x}} + \mathrm{Be}^{-\mathrm{ik}_x\mathrm{x}}$$

$$\mathrm{Y(y)} = \mathrm{Ce}^{\mathrm{ik}_y\mathrm{y}} + \mathrm{De}^{-\mathrm{ik}_y\mathrm{y}}$$

$$\mathrm{Z}(z) = \mathrm{Ee}^{\mathrm{ik}_z\mathrm{z}} + \mathrm{Fe}^{-\mathrm{ik}_z\mathrm{z}}$$

Vzemimo sedaj od vseh treh funkcij samo prve člene in napišimo celotno valovno funkcijo

$$\psi(\mathrm{x,y,z}) = \mathrm{Ae}^{\mathrm{ik}_x\mathrm{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{ik}_y\mathrm{y}}\mathrm{e}^{\mathrm{ik}_z\mathrm{z}} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{\mathrm{k}}\vec{\mathrm{r}}}.$$

$\vec{\mathrm{r}} = (x, y, z)$ je krajevni vektor ter $\vec{\mathrm{k}} = (\mathrm{k}_x, \mathrm{k}_y, \mathrm{k}_z)$ valovni vektor. Če dodamo še časovno odvisnost dobimo

$$\Psi(\mathrm{x,y,z,t}) = \mathrm{Ae}^{\mathrm{i}\vec{\mathrm{k}}\vec{\mathrm{r}}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\mathrm{Et}}{\hbar}}.$$

Tudi v 3D vidimo, da ima valovna funkcija prostega delca podobno obliko, kot jo imajo ravni valovi v klasični mehaniki.

Ko imamo samo en ravni val, si lahko koordinatni sistem vedno izberemo tako, da se ta ravni val giblje po koordinati osi x in imamo gibanje delca v eni dimenziji.