Kvantni delec v neskončni potencialni jami

Delec z maso m je zaprt v tridimenzionalni škatli. Potencial lahko zapišemo kot

$$V(x,z,y)=\begin{Bmatrix} 0,(0\le x\le a)\wedge(0\le y\le b)\wedge(0\le z\le c) \\ \infty,\mathrm{drugod} \end{Bmatrix},$$

kjer so a, b in c dolžina, širina in višina škatle. Ker nas trenutno zanimajo le stacionarna stanja, najprej rešimo stacionarno Schrödingerjevo enačbo

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

Najprej gremo po istem postopku kot pri prostem delcu v 3D in ločimo spremenljivke ($\psi(\mathrm{x,y,z})=\mathrm{X(x)Y(z)Z(z)}$) in dobimo

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

Tudi tu morajo biti posamezni členi konstantni

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

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

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

in imajo naslednjo rešitev kot v primeru enodimenzionalne jame

$$\mathrm{X(x)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\mathrm{k}_x\mathrm{x}),\ \mathrm{k}_x=\frac{n_x\pi}{a}$$

$$\mathrm{Y(y)}=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin(\mathrm{k}_y\mathrm{y}),\ \mathrm{k}_y=\frac{n_y\pi}{a}$$

$$\mathrm{Z(z)}=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin(\mathrm{k}_z\mathrm{z}),\ \mathrm{k}_z=\frac{n_z\pi}{c}$$

n_x, n_y in n_z so naravna števila. Energija stanja izračunamo kot

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

Izraz je odvisen od vseh treh kvantnih števil n_x, n_y in n_z in se poenostavi na

$$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\mathrm{h}^2}{8\mathrm{m}}\left(\left(\frac{n_x}{a}\right)^2+\left(\frac{n_y}{b}\right)^2+\left(\frac{n_z}{c}\right)^2\right).$$

Valovna funkcija pa se zapiše

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{2}{b}}\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{\mathrm{n}_x\pi\mathrm{x}}{a}\right)\sin\left(\frac{\mathrm{n}_y\pi\mathrm{y}}{a}\right)\sin\left(\frac{\mathrm{n}_z\pi\mathrm{z}}{a}\right).$$

Vidimo, da je podobno kot pri klasični mehaniki tudi tu gibanje v posameznih med seboj pravokotnih smereh neodvisno. To je tudi razlog, da lahko ločimo spremenljivke. Vsako koordinata nam predstavlja eno prostostno stopnjo. Stanje delca opišemo s tolikimi kvantnimi števili, kolikor prostostnih stopenj ima gibanje. V našem primeru imamo tri prostostne stopnje in zato imamo pri opisu tri kvantna števila. Če imamo škatlo brez kakršnekoli simetrije ($a \neq b \neq c$), imamo za vsako kombinacijo kvantnih števil drugačno energijo. Rečemo, da imamo neizrojena oziroma nedegenerirana stanja. O izrojenih oziroma degeneriranih stanjih govorimo, kadar eni energiji ustreza več stanj sistema. Če je v sistemu prisotna simetrija, dobimo degenerirana stanja.

Poglejmo si sedaj primer, ko ima škatla obliko kocke (a=b=c). V tem primeru se enačba za energijo poenostavi na

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

Najnižjo energijo ima le eno stanje, prvo vzbujeno stanje pa ima degeneracijo 3, ker imamo tri različna stanja z isto energijo. Rečemo tudi, da je stanje trikrat degenerirano.

V tabeli 1 imamo napisana kvantna števila in energije za nekaj najnižjih stanj delca v kockasti škatli.

Tabela 1: Prvih 5 energij in valovnih funkcij.

n_x	n_y	n_z	energija	degeneracija nivoja
1	1	1	$\frac{3h^2}{8ma^2}$	1
1	1	2	$\frac{6h^2}{8ma^2}$	3
1	2	1		
2	1	1		
1	2	2	$\frac{9h^2}{8ma^2}$	3
2	1	2		
2	2	1		
1	1	3	$\frac{11h^2}{8ma^2}$	3
1	3	1		
3	1	1		
2	2	2	$\frac{12h^2}{8ma^2}$	1
1	2	3	$\frac{14h^2}{8ma^2}$	6
1	3	2		
2	1	3		
2	3	1		
3	1	2		
3	2	1		