Opgave 1: En partikel i en boks

1) Indsættes $\psi = XYZ$ i schrödingerligningen giver det:

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

De partielle differentialer virker som almindelige differentialer hvor alle andre variable behandles som konstanter. Det samme gælder funktioner der ikke afhænger af den variabel der differentieres efter. Differentialerne er derfor:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}XYZ = YZ\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}XYZ = XZ\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}XYZ = XY\frac{\partial^2 Z}{\partial x^2}$$

Så schrödingerligningen bliver:

$$EXYZ = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(YZ\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + XZ\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + XY\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}\right)$$

Herefter deles med XYZ på begge sider af lighedstegnet for at isolere E.

$$E = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}\right)$$

2) Siden energien er en sum af tre funktioner der hver kun afhænger af en variabel, må hver af de tre funktioner også være konstante. Det giver de tre differentialligninger:

$$E_x = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \iff \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = \frac{-2mE}{\hbar}X$$
$$E_y = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \iff \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = \frac{-2mE}{\hbar}Y$$
$$E_z = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \iff \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = \frac{-2mE}{\hbar}Z$$

3) Disse differentialligninger er identiske til dem for den uendelige brønd. Løsningerne er de samme:

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n_x x}{L}\right) \qquad E_x = \frac{\pi^2 n_x^2 \hbar^2}{2mL^2} = E_1 n_x^2$$
$$Y_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n_y y}{L}\right) \qquad E_y = \frac{\pi^2 n_y^2 \hbar^2}{2mL^2} = E_1 n_y^2$$
$$Z_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n_z z}{L}\right) \qquad E_z = \frac{\pi^2 n_z^2 \hbar^2}{2mL^2} = E_1 n_z^2$$

Da $\psi = XYZ$ og $E = E_z + E_y + E_z$ er bølgefunktionen og den samlede energi:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{\pi n_x x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L}\right) \qquad E = E_1(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

4) De fem laveste mulige værdier for E er:

$$\begin{aligned} E_{111} &= 3E_1 \\ E_{112} = E_{121} = E_{211} &= 6E_1 \\ E_{122} = E_{212} = E_{221} &= 9E_1 \\ E_{113} = E_{131} = E_{311} &= 11E_1 \\ E_{222} &= 12E_1 \end{aligned}$$

Når felre stationære tilstande har samme energi siger man at de er udartede. Dog bruges fordanskningen af det engelske udtryk meget ofte, så de er nok bedre kendt under navnet degenereret.