

Phương trình Schrödinger 3 chiều (3D)

Giới thiệu

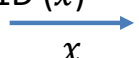
Phương trình Schrödinger tổng quát

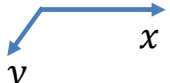
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad [4.1]$$


Toán tử Hamiltonian H (cổ điển)

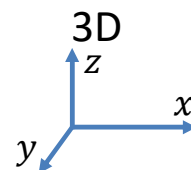
$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

1D \rightarrow 3D

1D (x)  $p^2 = p_x^2 \quad H = \frac{1}{2m} p_x^2 + V$

2D (x, y)  $p^2 = p_x^2 + p_y^2$
 $H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + V$

3D (x, y, z)  $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$
 $H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$



$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad [4.2]$$

$$\vec{p} \equiv \mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla \quad [4.3]$$


$$\Rightarrow p^2 = -\hbar^2 \nabla^2$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

Phương trình Schrödinger 3D

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r}, t) \Psi \quad [4.4]$$

với toán tử Laplace trong tọa độ Descartes

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad [4.5]$$


$$\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

Phương trình Schrödinger 3D

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$$

Xác suất để tìm thấy hạt trong miền thể tích vi phân $d^3\mathbf{r} = dxdydz$ là $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$

$$\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \quad [4.6]$$

Phương trình Schrödinger 3D

$$V = V(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi = \varphi(t) \psi(\mathbf{r})$$

→ tập hợp đầy đủ các trạng thái dừng

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [4.7]$$

$\psi_n(\mathbf{r})$ thỏa phương trình Schrödinger không phụ thuộc t

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad [4.8]$$

Phương trình Schrödinger 3D

$V = V(\mathbf{r})$: Nghiệm tổng quát

$$\Psi = \sum_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [4.9]$$

Bài tập “nhỏ”

Hãy xác định các giao hoán tử giữa toán tử \mathbf{r} và \mathbf{p} :

$$[x, y], [x, z], \dots \quad [x, p_x], [x, p_y], [x, p_z], \dots$$
$$[p_x, p_y], [p_x, p_z], [p_y, p_z], \dots$$

Bài tập “nhỏ”

$$\begin{aligned} [r_i, p_j] &= -[p_j, r_i] = i\hbar\delta_{ij}, \\ [r_i, r_j] &= [p_i, p_j] = 0 \end{aligned} \quad [4.10]$$

$$i, j = x, y, z. \quad r_x = x, r_y = y, r_z = z$$

Bài tập “nhỏ”

CM: $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle$ [4.11]

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle$$

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

[4.12]