جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم الكيمياء

كيمياء الكم

المرحلة الرابعة

محاضرة

جسيم في الصندوق

م .د.اسيا اكبر توفيق
asya.akbar@tu.edu.iq

تطرقنا سابقا على بعض الفرضيات ميكانيكا الكم حيث ستكون كافية من اجل اشتقاق والحصول على خواص العديد من أنظمة ميكانيكا الكم. ومن بين أنظمة ميكانيكا الكم البسيطة هي:

نظام جسيم حر **Free Particle**

وجسيم في صندوق **particle in a box**

والمهتــز التــوافقي Harmonic oscillator

الدوار الصلد

الجسيم الحر **Free Particle**

الجسيم الحر: هو الجسيم الذي لايتعرض الى اي قوة اي ان الجسيم يتحرك بحرية اي طاقته الكامنه مساوية الى صفر $V(x) = 0$

نفرض ان جسيم كتلته m يتحرك ببعد واحد على امتداد المحور السيني في مجال جهد يساوي صفر اي ان الطاقة الكامنة $V(x) = 0$ تساوي صفر

معادلة شرودنكر الغيرمعتمدة على الزمن في بعد واحد

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$V(x) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

نضرب في $\frac{-2m}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$$\because \quad E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\therefore \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \qquad (1)$$

الحل العام للمعادلة (1) تكون بالشكل التالي

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

حيث A ، B ثابتين اختياريين

ويمكن اعتبار الدالة e^{ikx} تمثل حركة جسيم يمتلك زخم $\hbar k$ وطاقة $(\frac{\hbar^2 k^2}{2m})$ ويتحرك بالاتجاه الموجب على المحور السيني (x) ، بينما الدالة e^{-ikx} تمثل حركة جسيم بالاتجاه السالب على المحور السيني ويفترض ان هذا الجسيم يمتلك نفس الزخم ونفس الطاقة

والان نطبق الحل على بعض الحالات الخاصه للجسيم الحر

1. الحالة الاولى:

اذا كان الجسيم يتحرك بالاتجاه الموجب على المحور السيني فان الدالة التي تصف حركة هذا الجسيم هي

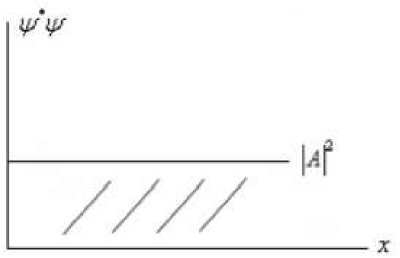
$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = A^* e^{-ikx} A e^{ikx}$$

$$= A^* A = |A|^2$$

وعند رسم $|\psi(x)|^2$ مع x نحصل على الرسم البياني المبين



وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت

2. الحالة الثانية:

ولما كان الجسيم يتحرك بالاتجاه السالب على المحور السيني فان الدالة التي تصف حركة هذا الجسيم هي

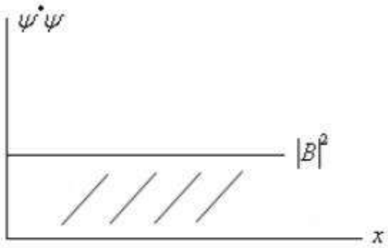
$$\psi(x) = Be^{-ikx}$$

فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = B^* e^{ikx} B e^{-ikx}$$

$$= B^* B = |B|^2$$

وعند رسم الرسم البياني بين $|\psi(x)|^2$ ، x نحصل على



وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت

3. الحالة الثالثة

اذا اخذنا حركة الجسيم في كلا الاتجاهين

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = (A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx})(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})$$

$$= A^*A + B^*B + A^*Be^{-2ikx} + B^*Ae^{2ikx}$$

فاذا جعلنا $A = B$ اي ان عدد الجسيمات متساويه في كلا الاتجاهين

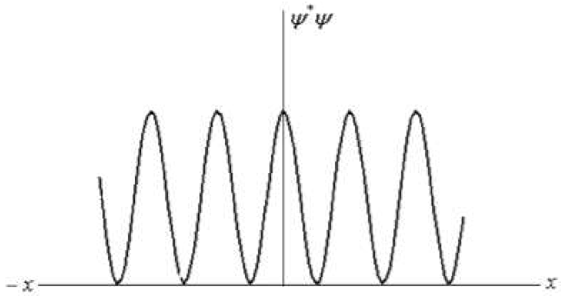
$$|\psi(x)|^2 = 2A^*A + A^*A\,(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$$

$$= 2A^*A(1 + \tfrac{1}{2}(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$$

$$= 2A^*A(1 + \cos 2kx)$$

$$= 4A^*A\cos^2 kx$$

وعند رسم $|\psi(x)|^2$ مع x نحصل على الشكل وهذا يشير الى ان الاحتمالية تتغير مع الموقع x



وبما ان الثابت k يمكن ان ياخذ اي قيمة وكذلك الطاقة E لان لاتوجد شروط حدودوية في حل معادلة الجسيم الحر وبذلك نحصل على طيف متصل من الطاقة. ولذلك نستطيع القول ان طاقة الجسيم الحر تكون غير مكممه.

ان مسألة الجسيم الحر تدلنا على احد التطبيقات لمبدأ اللاتحديد لها يزنبرك ، ولما كانت الدالة e^{+ikx} تصف حالة الجسم الذي زخمه $\hbar k$ وهذا مقدار ثابت فاننا نعرف زخمه بدقة كاملة (اي اللاتحديد في زخمه $\Delta p = 0$) وهذا يعني وفق مبدأ اللاتحديد $\Delta p \Delta x \geq \hbar$ عدم معرفة موقع الجسيم بصورة كاملة اي $\Delta x = \infty$

Q) Using the uncertainty Principle show that the variance in defining the position of a free particle is infinite.

<u>Solution</u>:

$$\Delta p\,\Delta x \geq \hbar$$

$\because\ p_x = \hbar k$ For free particle

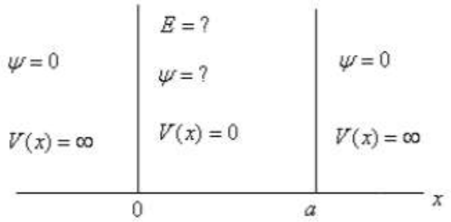
$$\therefore\ \Delta p_x = 0$$

$$\therefore\ \Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{\hbar}{\text{zero}} = \infty$$

$$\therefore\ \Delta x = \infty$$

Particle in Potential Box　　جسيم في صندوق

نفرض ان جسيما كتلته (m) مقيد الحركة داخل صندوق في المنطقة بين $(x=0 ، x=a)$ وطاقته الكلية E وطاقته الكامنة تتخذ على النحو الاتي وكما مبين في الشكل



$$V(x)=\begin{cases}0 & 0\le x\le a\\ \infty & 0\ge x\ge a\end{cases}$$

ولما كانت حركة الجسيم في المنطقة المحصورة بين $x=0$ ، $x=a$ ونظرا لوجود جدران صلبة عند نهايتي الصندوق اي ان $(V(x)=\infty)$ فان الجسيم لايستطيع ان يخترق الجدران وينفذ الى الخارج عند اصطدامه بها وعليه فان حركته تكون مقيدة بين جدران الصندوق.

وتتصرف الالكترونات الحرة في المعادن بطريقة مشابهة فعند اهمال تصادم الالكترونات مع الايونات الموجبة يكون ارتفاع الجهد اكبر بكثير من طاقة الالكترونات الحركية وبمقدور الالكترونات ان تتحرك بحرية في المعدن ولكن لايمكن الافلات منه

وترجع اهمية هذه المسالة الى كونها تسلط اضواء على حركة الجسيم في حيز محدد وتكمم طاقة الجسيم.

ولدراسة حركة هذا الجسيم نستخدم معادلة شرودنكر الغيرمعتمدة على الزمن وسندرس بعض الحالات .

1. **الحالة الاولى**: في المنطقة $(0\ge x\ge a)$ فان الحل المحتمل الوحيد لمعادلة شرودنكر هو ان $\psi(x)=0$

طالما ان $V(x)=\infty$ وبدوره فان كثافة الاحتمالية $|\psi(x)|^2=0$ وبالتالي فان احتمالية ايجاد الجسيم خارج الصندوق تساوي صفر.

2. **الحالة الثانية** : عندما يكون الجسيم داخل الصندوق حيث $V(x)=0$ في $(0\le x\le a)$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\,\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi(x)=0 \qquad ، \qquad V(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \qquad ، \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad ، \quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

حل هذه المعادلة يكون

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

ولايجاد المقدارين الثابتين A ، B نستخدم الشرطين الحدوديين الاتيين

دالة الموجة تتلاشى وتصبح قيمتها صفر عندما $x = 0$ وعند $x = a$

1. $\psi(x = 0) = 0$
2. $\psi(x = a) = 0$

اولا عند $x = 0$

$$A + B = 0 \longrightarrow A = -B$$

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx})$$

وباستخدام طريقة اويلر $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\sin\theta$

$$\therefore \psi(x) = A(\cos kx + i\sin kx - \cos kx + i\sin kx)$$

$$\therefore \psi(x) = 2iA\sin kx$$

$$\psi(x) = C\sin kx$$

حيث $C = 2iA$

ثانيا عند $x = a$

$$\psi(x = a) = C\sin ka = 0$$

الثابت C لايمكن ان يساوي صفر

$$\therefore ka = n\pi \longrightarrow \sin ka = 0$$

$$\therefore k = \frac{n\pi}{a}$$

حيث n يمثل عدد صحيح موجب $n = 1, 2, 3, \cdots\cdots$

وعند التعويض عن قيمة k نحصل على دالة الموجة وكذلك قيم طاقة الجسيم

$$\psi_n(x) = C\sin(n\pi x / a)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

(قيم الطاقة الذاتية لجسيم يتحرك في صندوق)

نستطيع ان نستنتج جملة من النقاط المهمة

1. طاقة الجسيم داخل الصندوق تكون مكممة اي لايمكن ان تكون اختيارية بل تاخذ قيم محددة (مكممة) فهذه القيم تشكل مستويات الطاقة

(Zero Point Energy) $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ $\quad n=1$

الحالة الارضية

$E_2 = 4E_1 \qquad n=2$

$E_3 = 9E_1 \qquad n=3$

$E_4 = 16E_1 \qquad n=4$

فيطلق على اوطأ مستوى طاقة المميز بـ $n=1$ بالحالة الارضية اما الحالات المستويات الاخرى يمكن تحديدها بالاعداد الكمية 4,3,2.......... فيطلق عليها بالحالات المتهيجة

$n=4$ ______________ $E_4 = 16E_1$

$n=3$ ______________ $E_3 = 9E_1$

$n=2$ ______________ $E_2 = 4E_1$

$n=1$ ______________ $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

2. لايمكن العدد الكمي n يساوي صفر وهذا يعني عدم وجود موجة او جسيم
3. ان الطاقة تتناسب مع a^{-2} فزيادته عرض الصندوق (a) فانها ستؤدي الى قيم طاقة اكثر تقاربا وعندما تقترب (a) من المالانهاية فان مستويات الطاقة تقترب مع بعضها وتصبح متصلة وهذه الحالة مشابهة للاطياف الذريه المستمره.

لايجاد الثابت C للمعادله $\psi_n(x) = C\sin(n\pi x/a)$ نستخدم الشرط العياري للدالات الموجية اي ان

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)\ dx = 1$$

$$\int C^* \sin(n\pi x/a)\ C \sin(n\pi x/a)\ dx = 1$$

$$C^2 \int_0^a \sin^2(n\pi x/a)\ dx = 1$$

وباستخدام $\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$

$$\frac{1}{2}C^2 \left\{ \int_0^a dx - \int_0^a \cos(2n\pi x/a)\ dx \right\} = 1$$

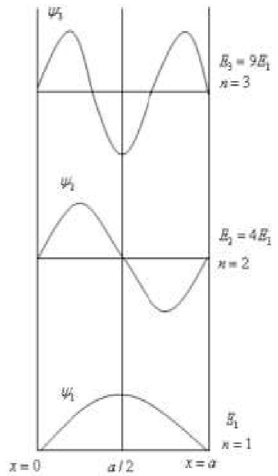
$$\tfrac{1}{2}C^2 \left\{ x\Big|_0^a - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)\sin(2n\pi x/a)\Big|_0^a \right\} = 1$$

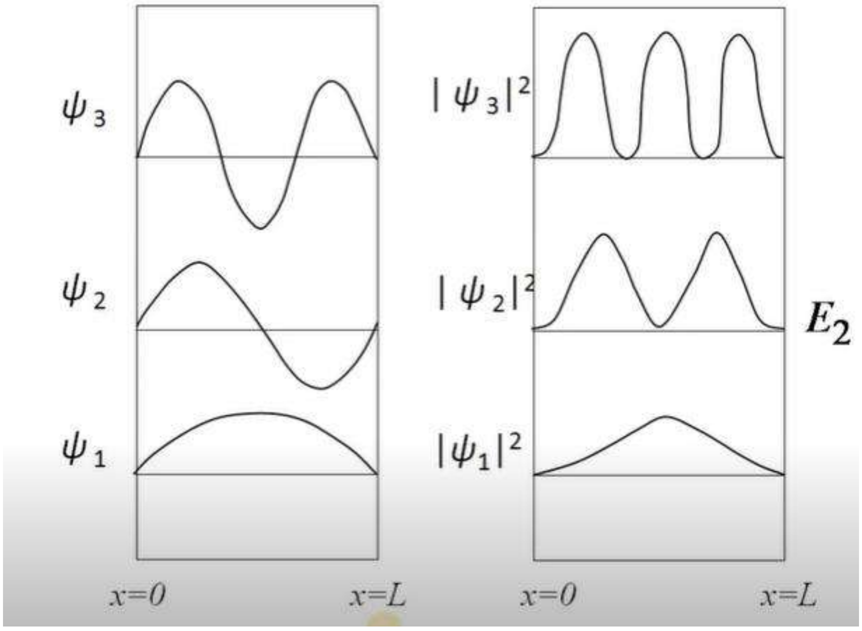
$$\tfrac{1}{2}C^2 \{(a-0) - (a/2n\pi)(0-0)\} = 1$$

$$\tfrac{1}{2}C^2 a = 1 \longrightarrow \qquad C = \sqrt{\tfrac{2}{a}}$$

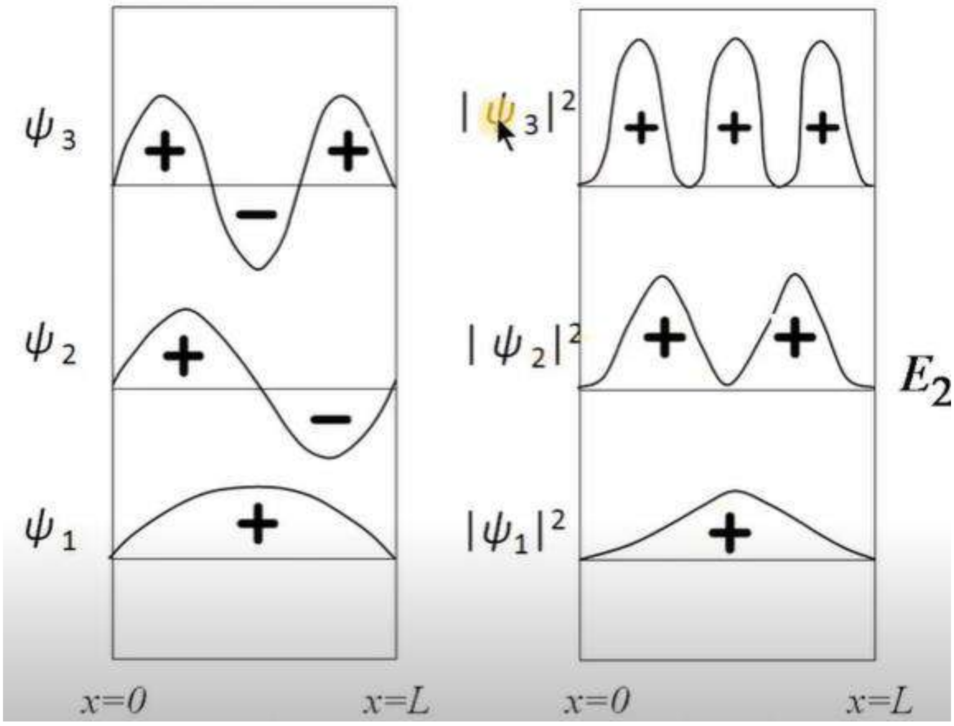
$$\therefore \quad \psi_n(x) = \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$$

والشكل يوضح الدالات الموجية الثلاثة الاولى ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_3

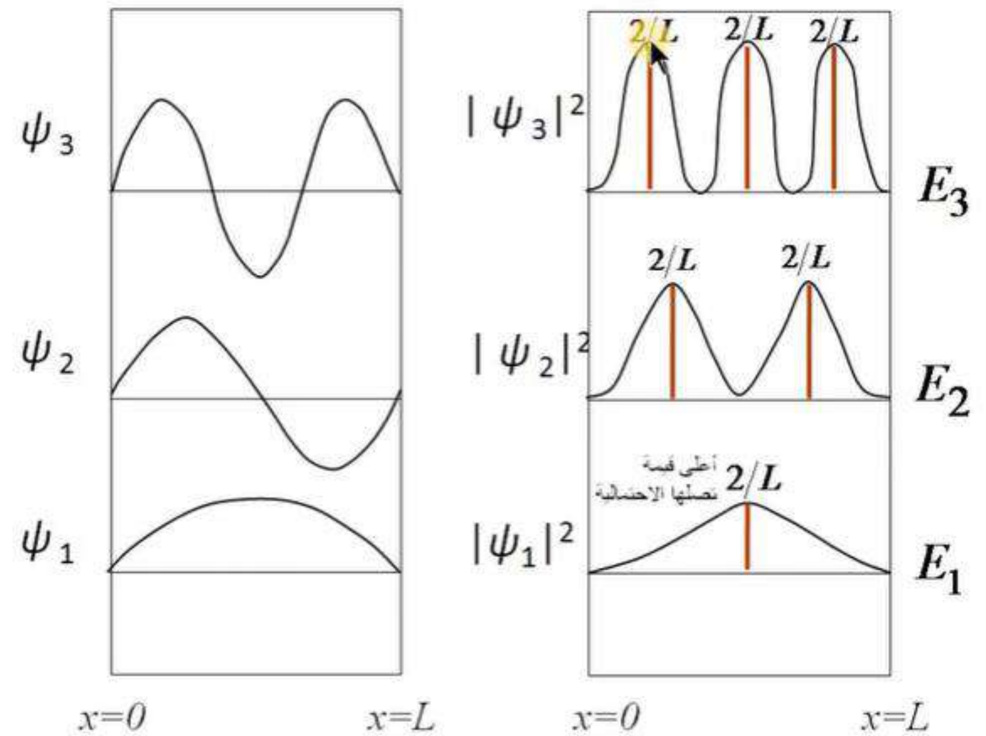




ψ_3
ψ_2
ψ_1
$|\psi_3|^2$
$|\psi_2|^2$
$|\psi_1|^2$
E_2
x=0
x=L
x=0
x=L



ψ_3
ψ_2
ψ_1
$|\psi_3|^2$
$|\psi_2|^2$
$|\psi_1|^2$
E_2
x=0
x=L
x=0
x=L



نلاحظ ما يأتي: 1. الشروط الحدودية تجعل الدالة الموجية تساوي صفراً دائماً عند طرفي الصندوق. 2. قيم الدوال الموجية تكون سالبة وموجبة بينما قيم كثافة الاحتمالية موجبة دائماً 3. هناك قمة واحدة للاحتمالية في المستوي الاول وقمتان للمستوي الثاني ...الخ 4. أعلى قيمة للاحتمالية تساوي $2/L$ ويختلف موضعها باختلاف مستوى الطاقة ، فمثلاً بالنسبة للمستوى الاول تكون في الوسط وللمستوي الثاني تكون في منتصف النصفين الاول والثاني وبالنسبة للمستوي الثالث تكون في منتصف الثلث الاول والثاني والثالث.

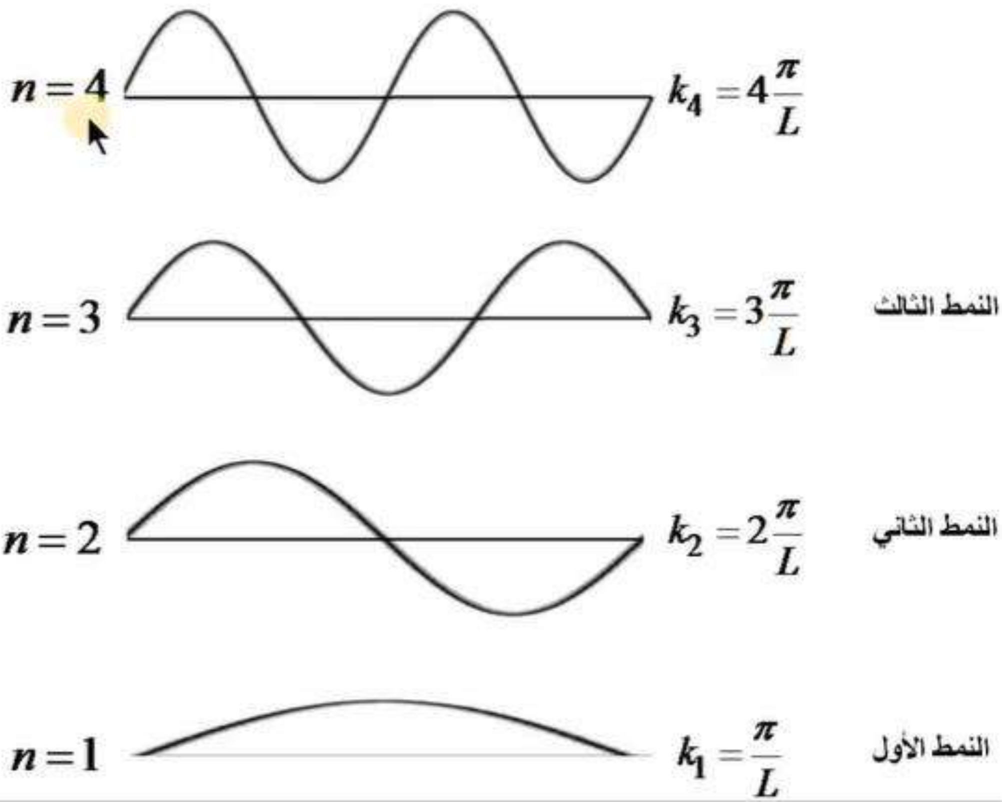
في فيزياء الحالة الصلبة يهتم العلماء بدراسة زخم الالكترون في المادة الصلبة

حسب الصيغة الثانية لفرضية ديبرولي ، زخم الالكترون يعطى بالعلاقة :

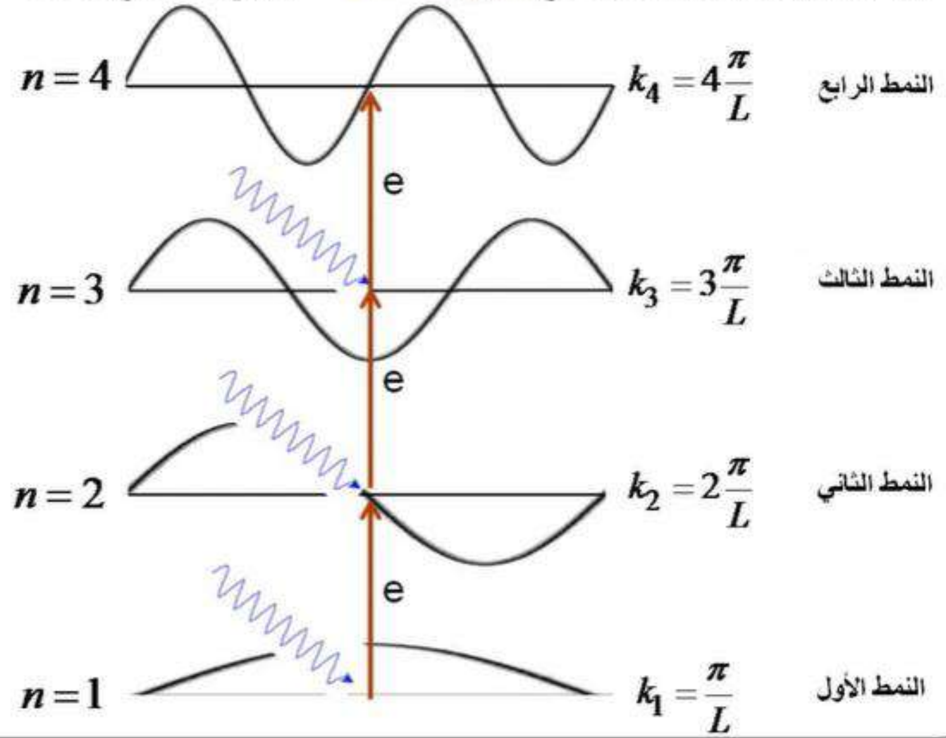
$$p = k\hbar$$

نلاحظ أن الزخم هو دالة للعدد الموجي ، لذلك يمكن الاستعاضة عن زخم الالكترون برسم العدد الموجي للألكترون ، وبتعبير آخر حينما نرى العدد الموجي يجب أن نتذكر الزخم دائماً .

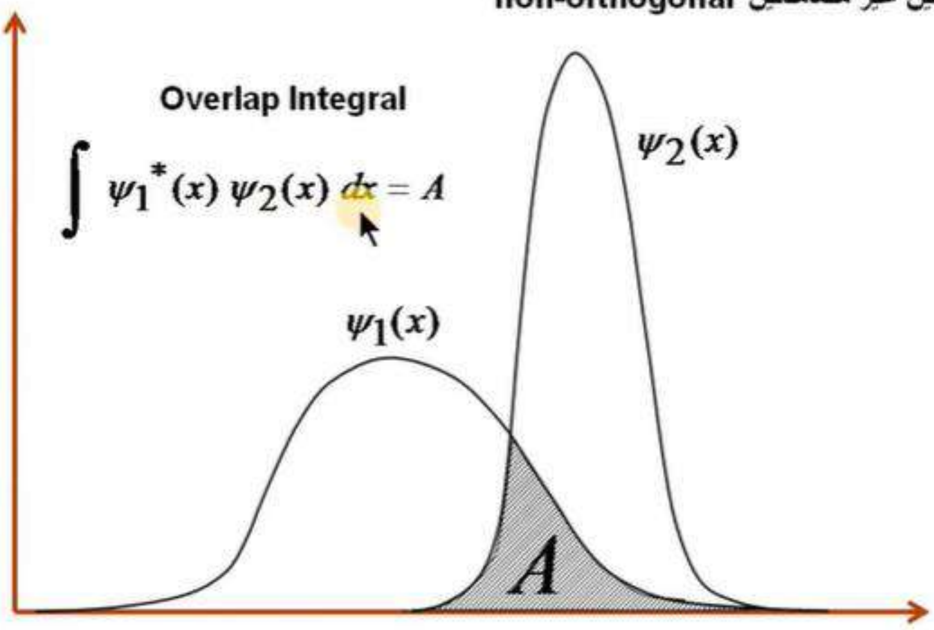
بناءاً على ذلك ، سوف نرسم العدد الموجي بدلاً من الزخم وكما يأتي :


$n=4$
$k_4 = 4\frac{\pi}{L}$
$n=3$
$k_3 = 3\frac{\pi}{L}$
النمط الثالث
$n=2$
$k_2 = 2\frac{\pi}{L}$
النمط الثاني
$n=1$
$k_1 = \frac{\pi}{L}$
النمط الأول

هذا يعني اذا كان الجسيم محصورا فان هناك انماط معينه يسمح لها بالاهتزاز والتواجد داخل الصندوق وغيرها تعتبر ممنوعة. الترددات المسموحة هي التي تقابل الأعداد الموجية k1 و k2 و k3 و k4 ... الخ وليس هناك عدد موجي مسموح أو تردد مسموح بينها.

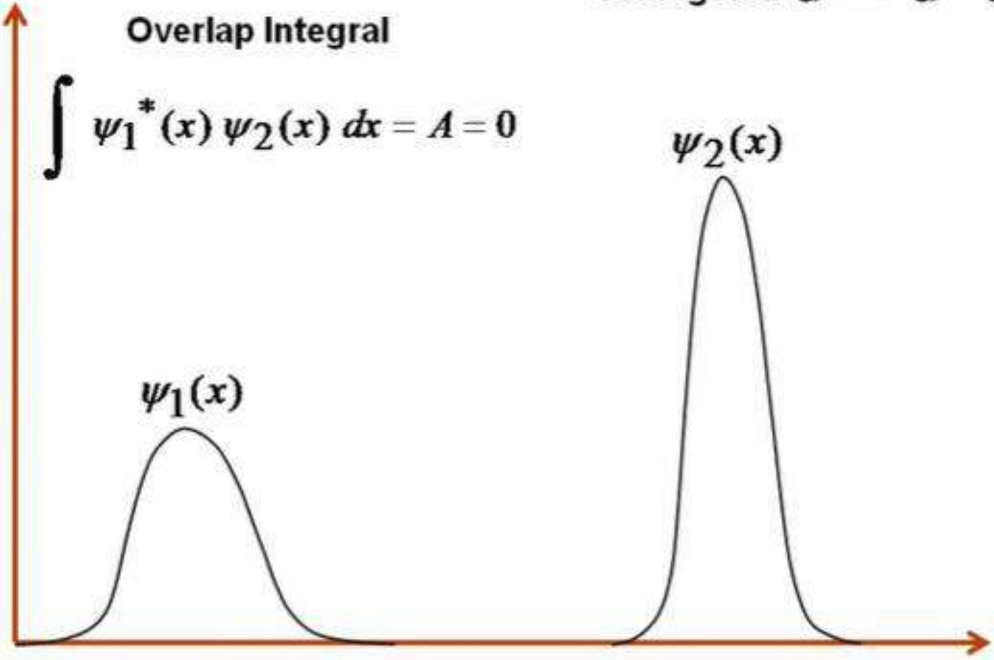


تصور دالتين غير متعامدتين **non-orthogonal**



يمثل تكامل التداخل مدى الاشتراك بين الدالتين ويساوي رياضياً المساحة المشتركة بين الدالتين=A

تصور الآن دالتين متعامدتين **Orthogonal**



في الدوال المتعامدة لا يوجد اشتراك بين الدالتين والمساحة المشتركة بين الدالتين = 0

Q) Show that the wave function that described particle move in a potential box are orthogona

Solution:

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = 0 \qquad \text{Orthogonal} \quad (\text{متعامدة})$$

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) \cdot \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(m\pi x/a) \, dx$$

$$= \tfrac{2}{a} \int_0^a \sin(n\pi x/a) \cdot \sin(m\pi x/a) \, dx$$

$$\sin \alpha x \sin \beta x = \tfrac{1}{2}\{\cos(\alpha - \beta)x - \cos(\alpha + \beta)x\}$$ وباستخدام العلاقة

$$\tfrac{1}{a} \int_0^a \{\cos(n-m)\pi x/a - \cos(n+m)\pi x/a\} \, dx$$

$$\frac{1}{a}\left\{\frac{a}{(n-m)\pi} \sin(n-m)\pi x/a - \frac{a}{(n+m)\pi} \sin(n+m)\pi x/a\right\}\Bigg|_0^a$$

$$\frac{1}{a}\left\{\frac{a}{(n-m)\pi} \sin(n-m)\pi - \frac{a}{(n+m)\pi} \sin(n+m)\pi\right\}$$

$\because$ $(n-m)$ and $(n+m)$ are integer

$$\therefore \quad \int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = 0$$

Q) Show that the wave function that described particle move in a potential box are normalized

Solution:

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_n \, dx = 1 \qquad \text{normalized} \quad (\text{عبارية})$$

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_n \, dx = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) \cdot \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) \; dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2(n\pi x/a) \, dx$$

$$\sin^2\theta = \tfrac{1}{2}(1 - \cos 2\theta) \qquad \text{وباستخدام العلاقة}$$

$$\therefore \quad = \frac{2}{a} \int_0^a \{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2n\pi x/a)\} \; dx$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a dx - \frac{1}{a} \int_0^a \cos(2n\pi x/a) \, dx$$

$$\frac{1}{a} (x)\Big|_0^a - \frac{1}{a} \frac{a}{2n\pi} \sin(\frac{2n\pi x}{a})\Big|_0^a$$

$$\frac{1}{a}(a - 0) - \frac{1}{2n\pi} \sin(2n\pi)$$

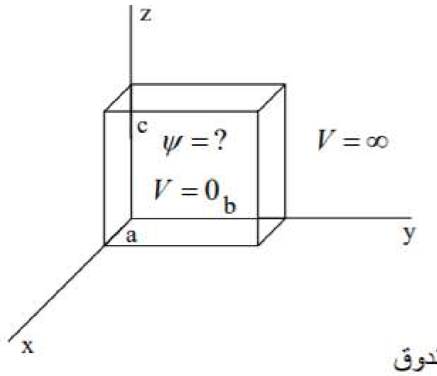
$$\because \; n \text{ is integer} \quad \Rightarrow \quad \sin 2n\pi = 0$$

$$\therefore \; \int_0^a \psi_n^* \psi_n dx = 1$$

Particle in Potential Box in three dimensions

سنبحث الان حالة الجسيم الحر في داخل صندوق الذي ابعاده a ، b ، c على التوالي ولنفرض ان اضلاع الصندوق مطابقة للمحاور الكارتيزية (x ، y ، z) ونقطة الاصل 0 تقع في احد زواياه كما في الشكل.

داخل الصندوق يكون الجهد $V = 0$ اما خارج الصندوق فان $V = \infty$



معادلة شرودنكر الغيرمعتمدة على الزمن داخل الصندوق

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2} + k^2\,\psi(x,y,z) = 0 \quad \text{..........*}$$

حيث ان $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

حيث ان $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

ولحل المعادلة * نستخدم طريقة فصل المتغيرات باعتبار ان الدالة $\psi(x,y,z)$ تساوي حاصل ضرب ثلاث دوال بالشكل

$$\psi(x,y,z) = \psi(x)\cdot\psi(y)\cdot\psi(z)$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} = \psi(y)\cdot\psi(z)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2} = \psi(x)\cdot\psi(z)\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2} = \psi(x)\cdot\psi(y)\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}$$

Using the same procedure we can get

$$\psi(x) = c_x \sin k_{(x)} x$$

$$\psi(y) = c_y \sin k_{(y)} y$$

$$\psi(z) = c_z \sin k_{(z)} z$$

$$\psi(x,y,z) = c_x \sin(k_{(x)} x) \cdot c_y \sin(k_{(y)} y) \cdot c_z \sin(k_{(z)} z)$$

$$\psi(x,y,z) = C \sin(\frac{n_x \pi}{a} x) \cdot \sin(\frac{n_y \pi}{b} y) \cdot \sin(\frac{n_z \pi}{c} z)$$

وبتعويض هذه الكميات والقسمة على $\psi(x,y,z)$ نحصل على

$$\frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi(y)} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + \frac{1}{\psi(z)} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + k^2 = 0$$

وواضح فان كل حد من المعادلة اعلاه يجب ان يساوي ثابتا ولتكن هذه الثوابت $-k_{(x)}^2$ ، $-k_{(y)}^2$ ، $-k_{(z)}^2$

$$\left.\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_{(x)}^2 \psi(x) = 0 \\ \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + k_{(y)}^2 \psi(y) = 0 \\ \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + k_{(z)}^2 \psi(z) = 0 \end{aligned}\right\} \qquad **$$

$$k = k_{(x)}^2 + k_{(y)}^2 + k_{(z)}^2$$

والحل العام لكل من المعادلات الثلاثة ** اعلاه على التوالي

$$\psi(x) = A_x e^{ik_{(x)}x} + B_x e^{-ik_{(x)}x}$$

$$\psi(y) = A_y e^{ik_{(y)}y} + B_y e^{-ik_{(y)}y}$$

$$\psi(z) = A_z e^{ik_{(z)}z} + B_z e^{-ik_{(z)}z}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_{(x)}^2 + k_{(y)}^2 + k_{(z)}^2)$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi}{2m}(\frac{n_x^2}{a} + \frac{n_y^2}{b} + \frac{n_z^2}{c})$$

If $a = b = c = a$

$$\therefore \quad = \frac{\hbar^2 \pi}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

نفرض ان $E_1 = \dfrac{\hbar^2 \pi}{2ma^2}$ حيث ان E_1 مقدار ثابت

$$\therefore \quad E = E_1 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

وطبيعي فان مستويات الطاقة تعتمد على $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ وفي جميع الحالات التي تكون فيها الاعداد الكمية مرتبة بحيث يعطي نفس القيمة للعبارة $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ تكون طاقاتها متساوية وبطبيعة الحال يمكن تبديل n_z, n_y, n_x بدون ان يتغير المقدار العبارة $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ وهذا يعني ان دوال الموجة تتغير بينما يبقى مستوى الطاقة كما هو، اي انه منحل حسب تعريف الانحلال ودرجة الانحلال هنا تساوي عدد الترتيبات الممكنة للاعداد الكمية n_z, n_y, n_x وفيما يلي جدولا يبين عدد الترتيبات n_z, n_y, n_x لست حالات مختلفة

Energy	**Combination of** n_z, n_y, n_x	**degeneracy**
$3E_1$	(1,1,1)	1
$6E_1$	(1,1,2) (1,2,1) (2,1,1)	3
$9E_1$	(1,2,2) (2,1,2) (2,2,1)	3
$11E_1$	(3,1,1) (1,3,1) (1,1,3)	3
$12E_1$	(2,2,2)	1
$14E_1$	(1,2,3) (3,2,1) (2,3,1) (1,3,2) (2,1,3) (3,1,2)	6