Perturbacija potencialne jame

Matija Perne

18.5.2005

Običajna neskončna potencialna jama pomeni potencial oblike

$$V(q) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < a, \\ \infty & ; \quad x > a, x < 0. \end{cases}$$

Obravnavani problem

$$V(q) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < b, \\ V_0 & ; \quad b < x < a, \\ \infty & ; \quad x > a, x < 0. \end{cases}$$

se le malo razlikuje od take jame, zato jo bom vzel za izhodišče (saj je že davno rešena), popravke pa izračunal s perturbacijsko teorijo. Najprej pa ponovimo, kakšna so lastna stanja in energije take navadne jame. Lastne funkcije so $|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x), k_n = \frac{n\pi}{a}$. Lastne energije pa so $E_n = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.

Na kratko o perturbacijski teoriji 1. reda: če hamiltonki H_0 pripada lastna baza $|n\rangle$ in lastne energije E_n, bodo lastne energije za malo popravljeno hamiltonko $H = H_0 + V$ približno enake $E'_n = E_n + E^1_n$, kjer je $E^1_n = \langle n| V |n\rangle$.

Ostane nam le še izračun $E^1_n = \langle n| V |n\rangle$:

$$E^1_n = \int_b^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right) V_0 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right) \mathrm{d}x = \frac{2}{a}V_0 \int_b^a \sin^2\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{2}{a}V_0\left(\frac{1}{2}x - \frac{4a}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{x}{a}\right)\right)\Bigg|_b^a = \frac{2}{a}V_0\left(\frac{1}{2}(a-b) - \frac{4a}{n\pi}\left(0 - \sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)\right) =$$

$$= \frac{2}{a}V_0\left(\frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b + \frac{4a}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right) = V_0\left(1 - \frac{b}{a} + \frac{8}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right).$$

Energijo n-tega lastnega stanja motene potencialne jame smo ocenili na

$$E'_n = E_n + E^1_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2} + V_0\left(1 - \frac{b}{a} + \frac{8}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right).$$

Rešitve našega problema naj bi se ujemale z lihimi rešitvami problema, ki ga je rešila Marija, v limiti $E \gg V_0$. To je:

$$ka = n\pi + \frac{V_0\hbar^2}{4mk}(a-b),$$

kjer je s k označen valovni vektor na območju pri potencialu 0. Da bomo rešitve lahko primerjali, moramo izračunati k:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m\left(E_n + E_n^1\right)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE_n\left(1 + \frac{E_n^1}{E_n}\right)}}{\hbar} =$$

$$= \frac{\sqrt{2m\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1 + \frac{V_0\left(1 - \frac{b}{a} + \frac{8}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)2ma^2}{n^2\hbar^2\pi^2}\right)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} + \frac{V_0 ma\left(1 - \frac{b}{a} + \frac{8}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)}{n\pi\hbar^2} =$$

$$= \frac{n\pi}{a} + \frac{V_0 m\left(a - b + \frac{8a}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)}{n\pi\hbar^2}$$

$$ka = n\pi + \frac{V_0 ma\left(a - b + \frac{8a}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)}{n\pi\hbar^2}$$

Če v drugem členu upoštevamo $k \approx \frac{n\pi}{a}$, dobimo

$$ka = n\pi + \frac{V_0 m\left(a - b + \frac{8a}{n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{b}{a}\right)\right)}{k\hbar^2},$$

kar je zelo blizu rešitvi ekvivalentnega problema po drugi poti dne 23.2.2005, kar smo tudi hoteli pokazati. ■