Fakulteta za matematiko in fiziko Jugoslav Njenjić
Kvantna mehanika 1 Ljbljana, april 2006

Vaje iz Kvantne mehanike 1

Bozona v jami (22.3.2006)

Problem: V končni potencialni jami imamo dva bozona, ki sta med seboj šibko sklopljena s potencialom $V(x_1, x_2) = W_0\,\delta\,(x_1 - x_2)$. Kadar je v jami en sam bozon, se lahko nahaja v enem od dveh vezanih stanj, ki ju predsstavimo kar z osnovnima lastnima stanjema neskončne potencialne jame. Koliko stanj pričakujemo za dva bozona v jami (upoštevaj simetrijo valovne funkcije na zamenjavo delcev)? Kolikšne so energije teh stanj in kako so odvisne od sklopitve W_0?

Rešitev problema:

Vemo:

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x)$$

$$E_n = \frac{h^2 \cdot n^2}{8 \cdot m \cdot a^2}$$

Hamiltonian zapišemo kot vsoto hamiltonianov prvega in drugega bozona ter potenciala,

$$H = H_1 + H_2 + V$$

valovne funkcije sistema dveh bozonov pa kot:

a) $\varphi_1 = \psi_1(x_1) \cdot \psi_1(x_2)$
b) $\varphi_2 = \psi_2(x_1) \cdot \psi_2(x_2)$
c) $\varphi_3 = 2^{-1/2} \cdot (\psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2) + \psi_2(x_1) \cdot \psi_1(x_2))$.

(primer a – oba delca sta v prvem stanju; primer b – oba delca sta v drugem stanju; primer c – kombinacija obeh stanj)

Izračun hamiltonianov:

$$H_{ij} = \langle \varphi_i \mid H \mid \varphi_j \rangle$$

$$H_{11} = \langle \varphi_1 \mid H \mid \varphi_1 \rangle = \langle \psi_1\, \psi_1 \mid H_1 \mid \psi_1\, \psi_1 \rangle + \langle \psi_1\, \psi_1 \mid H_2 \mid \psi_1\, \psi_1 \rangle + \langle \psi_1\, \psi_1 \mid V \mid \psi_1\, \psi_1 \rangle$$

Op.: Pri takšnem zapisu upoštevamo, da je prvi ψ_1 za prvi delec, drugi pa za drugi.

$$H_{11} = E_1 + E_1 + \iint \psi_1(x_1) \cdot \psi_1(x_2) \cdot W_0 \cdot \delta(x_1 - x_2) \cdot \psi_1(x_1) \cdot \psi_1(x_2) dx_1 dx_2 =$$
$$= 2 \cdot E_1 + W_0 \int (\psi_1{}^2)^* \cdot (\psi_1)^2 dx_1 =$$
$$= 2 \cdot E_1 + W_0 \int (\psi_1)^4 dx_1 =$$
$$= 2 \cdot E_1 + W_0 \int (\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(\frac{\pi}{a} \cdot x))^4 dx =$$
$$= 2 \cdot E_1 + \frac{4}{a^2} \cdot W_0 \cdot \frac{3}{8} \cdot a$$

$$H_{11} = 2 \cdot E_1 + \frac{3 \cdot W_0}{2 \cdot a}$$

Op.: Pri reševanju zgornjega računa smo upoštevali sledeče:

- pri prehodu iz dvojnega v enojni integral nam δ spremeni integracijo po x_2 v x_1 (oz. obratno,
- valovna funkcija je realna
- širina jame je a (t.j. meja integrala je 0 in a)

Enako izračunamo tudi H_{22}.

$$H_{22} = 2 \cdot E_2 + \frac{3 \cdot W_0}{2 \cdot a}$$

$$H_{33} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \cdot (< \psi_1\psi_1 | H | \psi_1\psi_1 > + < \psi_1\psi_2 | H | \psi_2\psi_1 > + < \psi_2\psi_1 | H | \psi_1\psi_2 > +$$
$$+ < \psi_2\psi_1 | H | \psi_2\psi_1 >) =$$
$$= \frac{1}{2} \cdot (E_1 + E_2 + E_2 + E_1 + I)$$

Op.: Drugi in tretji člen nam razen prispevka potencialov ne dasta ničesar zardi ortogonalnosti funkcij.

$$I = \iint (\psi_1\psi_1 V \psi_1\psi_1 + \psi_1\psi_2 V \psi_2\psi_1 + \psi_2\psi_1 V \psi_1\psi_2 + \psi_2\psi_1 V \psi_2\psi_1) dx_1 dx_2 =$$
$$= 4 \cdot W_0 \cdot \int (\psi_1\psi_2)^2 dx =$$
$$= \frac{16 \cdot W_0}{a^2} \int (\sin(\frac{\pi}{a} \cdot x))^2 \cdot (\sin(\frac{2 \cdot \pi}{a} \cdot x))^2 dx =$$
$$= \frac{16 \cdot W_0}{a^2} \cdot \frac{a}{4} =$$
$$= \frac{4 \cdot W_0}{a}$$

$$H_{33} = E_1 + E_2 + \frac{2 \cdot W_0}{a}$$

Op.: Reševanje integrala – glej op. pri izračunu H_{11}.

$$H_{12} = <\psi_1\,\psi_1 \mid H_1 \mid \psi_2\,\psi_2> + <\psi_1\,\psi_1 \mid H_2 \mid \psi_2\,\psi_2> + <\psi_1\,\psi_1 \mid V \mid \psi_2\,\psi_2>$$

Op.: Zaradi ortogonalnosti je prispevek obeh prvih členov enak nič.

$$H_{12} = \iint \psi_1(x_1)\,\psi_1(x_2)\cdot W_0\cdot\delta(x_1-x_2)\cdot\psi_2(x_1)\cdot\psi_2(x_2)dx_1dx_2 =$$
$$= W_0\int \psi_1^{\,2}\,\psi_2^{\,2}dx$$

$$H_{12} = \frac{W_0}{a}$$

Op.: V nadaljevanju vidimo, da imamo samo še prispevke potencialov (ortogonalnost).

$$H_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot(<\psi_1\psi_1 \mid V \mid \psi_1\psi_2> + <\psi_1\psi_1 \mid V \mid \psi_1\psi_2>) =$$
$$= \frac{2\cdot W_0}{\sqrt{2}}\int \psi_1^{\,3}\psi_2 dx =$$
$$= \frac{8\cdot W_0}{\sqrt{2}\cdot a^2}\int (\sin(\frac{\pi}{a}\cdot x))^3\cdot(\sin(\frac{2\cdot\pi}{a}\cdot x))dx = 0$$

$$H_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot(<\psi_2\psi_2 \mid V \mid \psi_1\psi_2> + <\psi_2\psi_2 \mid V \mid \psi_1\psi_2>) =$$
$$= \frac{2\cdot W_0}{\sqrt{2}}\int \psi_2^{\,3}\psi_1 dx =$$
$$= \frac{8\cdot W_0}{\sqrt{2}\cdot a^2}\int (\sin(\frac{2\cdot\pi}{a}\cdot x))^3\cdot(\sin(\frac{\pi}{a}\cdot x))dx = 0$$

Zaradi simetrije delcev je udi matrika simetrična.

$$H_{12} = H_{21};\ H_{13} = H_{23} = H_{31} = H_{32} = 0.$$

$$H = \begin{bmatrix} 2\cdot E_1 + \frac{3\cdot W_0}{2\cdot a} & \frac{W_0}{a} & 0 \\ \frac{W_0}{a} & 2\cdot E_2 + \frac{3\cdot W_0}{2\cdot a} & 0 \\ 0 & 0 & E_1 + E_2 + \frac{2\cdot W_0}{a} \end{bmatrix}$$

Če izračunamo lastne vrednosti matrike H, dobimo:

$$\lambda_{1,2} = E_1 + E_2 + \frac{3\cdot W_0}{2\cdot a} \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + \frac{W_0}{a^2}}$$

Jugoslav Njenjić
Ljbljana, april 2006

$$\lambda_3 = E_1 + E_2 + \frac{2 \cdot W_0}{a}$$