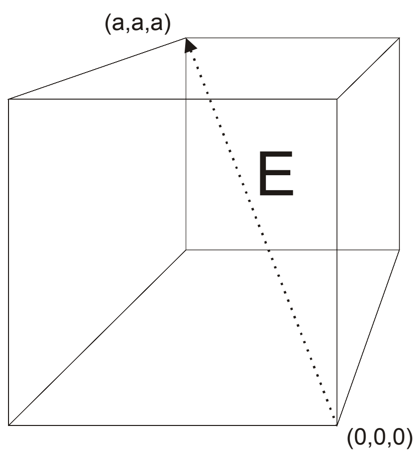
Kvantna mehanika I - Delec v kockasti potencialni jami

4.6 2005

1. Navodilo

Poišči lastne energije in lastna stanja delca, ki se giblje v kockasti neskončni potencialni jami s stranico a. Kakšne so energije najnižjih štirih vzbujenih lastnih stanj, ko vklopimo majhno električno polje E, ki kaže vzdolž diagonale kocke?

2. Rešitev



Kocka s stranico a
Potencial znotraj kocke (pred vklopom polja) je 0 medtem ko gre v okolici proti neskončno.

Ko vklopim zunanje polje, ta kaže v smeri diagonale kot je označeno na skici.

V škatli je delec z nabojem e in maso m.

2.1. Lastna stanja 3D neskončne potencialne jame

Robni pogoji so enaki kot pri navadni potencialne jami le da tu veljajo za vse tri stene. Edina razlika pri reševanju je v tem da za nastavek vzamem $\Psi = X(x)Y(y)Z(z)$. Naredim še eno separacijo spremenljivk in dobim rezultat:

$$\Psi = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin(\frac{l\pi}{a}x)\sin(\frac{m\pi}{a}y)\sin(\frac{n\pi}{a}z) = \sin(k_1 x)\sin(k_2 y)\sin(k_3 z) \qquad (1.1)$$

$$k^2 = k_1^{\,2} + k_2^{\,2} + k_3^{\,2}$$

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (l^2 + n^2 + m^2) \qquad (1.2)$$

Morebitni bralec si lahko pot do zgornje rešitve bolj podrobno ogleda v knjigi Matematika v fiziki in tehiki (Mafi – Kodre), saj je to tudi rešitev za opno (le da je opna dvodimenzionalna).

2.2. Stanja popačena s šibkim zunanjim poljem

Zanimajo me popravki prvih štirih vzbujenih stanj zaradi zunanjega polja. Zapišem lahko

$\vec{\mathrm{E}} = \begin{pmatrix} E \\ E \\ E \end{pmatrix}$ ker vem da je $\vec{E} = -\nabla U$ lahko takoj zapišem potencial v škatli in sicer

$$U = -E(x + y + z) \qquad (1.3)$$

Spekter je degeneriran in sicer prvo vzbujeno stanje i=2 ima 3 lastne funkcije. Morda ne škodi tabela možnih degeneracij za prva štiri vzbujena stanja

stanje	l	n	m	j	št. stanj
osnovno	1	1	1	1	**1**
prvo vzbujeno	1	1	2	1	
	1	2	1	2	
	2	1	1	3	**3**
drugo zbujeno	2	2	1	1	
	2	1	2	2	
	1	2	2	3	**3**
tretje vzbujeno	1	1	3	1	
	1	3	1	2	
	3	1	1	3	**3**
četrto vzbujeno	2	2	2	1	**1**

tabela (1.4)

Uvedem nov pomožni indeks j s katerim označim posamezno degenerirano stanje.

Zanimajo me popravki prvega reda, za osnovno stanje je popravek k energiji kar

$$E_0^{(1)} = \left\langle \Psi_3 \middle| V \middle| \Psi_3 \right\rangle = -eE\left(\frac{2}{a}\right)^3 \int_0^a\int_0^a\int_0^a \sin^2(\frac{\pi}{a}x)\sin^2(\frac{\pi}{a}y)\sin^2(\frac{\pi}{a}z)(x+y+z)dxdydz = -e\frac{3}{2}aE$$

$$V = eU$$

Podobno pridem do rezultata tudi pri četrtem vzbujenem stanju, ki je tudi nedegenerirano. Rezultat je enak.

$$E_4^{(1)} = \left\langle \Psi_3 \middle| V \middle| \Psi_3 \right\rangle = -eE\left(\frac{2}{a}\right)^3 \int_0^a\int_0^a\int_0^a \sin^2(\frac{2\pi}{a}x)\sin^2(\frac{2\pi}{a}y)\sin^2(\frac{2\pi}{a}z)(x+y+z)dxdydz = -e\frac{3}{2}aE$$

Pri ostalih primerih je treba stanje razviti, oziroma na kratko, poiskati je potrebno matriko:

$$E_{ab}^{(1)} = \left\langle \Psi_j \middle| V \middle| \Psi_{j'} \right\rangle \qquad (1.5)$$

recimo za pvo vzbujeno stanje

$$E_2^{(1)} = \begin{bmatrix} \langle \Psi_1|V|\Psi_1\rangle & \langle \Psi_2|V|\Psi_1\rangle & \langle \Psi_3|V|\Psi_1\rangle \\ \langle \Psi_1|V|\Psi_2\rangle & \langle \Psi_2|V|\Psi_2\rangle & \langle \Psi_3|V|\Psi_2\rangle \\ \langle \Psi_1|V|\Psi_3\rangle & \langle \Psi_2|V|\Psi_3\rangle & \langle \Psi_3|V|\Psi_3\rangle \end{bmatrix} \qquad (1.6)$$

indeks 1,2,3 pri valovni fukciji je indeks j iz tabele (1.4).
kjer so lastne vrednosti željeni popravki k energiji degeneriranih stanj.

$$E_2^{(1)} = -eE\begin{bmatrix} \frac{3}{2}a & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{2}a \end{bmatrix}$$

Torej degeneracija ostane enaka le energija se premakne se premakne za $-e\frac{3}{2}aE$.

Rezultat je enak za vsa vzbujena stanja.