KVANTNA MEHANIKA I

Delec v kroglasti potencialni jami

Gregor Kladnik

astronomsko-geofizikalna smer

1 Naloga

Poišči lastne energije in lastna stanja delca, ki se giblje v kroglasti neskončni potencialni jami s polmerom a. Kakšne so energije najnižjih štirih vzbujenih lastnih stanj, ko vklopimo majhno električno polje $\mathcal{E}$?

2 Rešitev

2.1 Lastne energije in lastna stanja nemotenega delca

Rešujemo Schrödingerjevo enačbo

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{2.1.1}$$

kjer je $\hat{H}$ hamiltonov operator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ in E energija (lastna vrednost lastnega stanja ψ). V primeru sfernih koordinat že poznamo ustrezni nastavek, ki se glasi

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{2.1.2}$$

kjer so $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sferni harmoniki. Zapišimo sedaj parcialno diferencialno enačbo za radialno odvisnost in jo rešimo!

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0, \tag{2.1.3}$$

kjer smo označili $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, potencial V je namreč na celotnem definicijskem območju enak 0. Zgornjo enačbo s substitucijo $\xi = kr$ preoblikujemo v brezdimenzijsko obliko

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{\partial R}{\partial \xi} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\xi^2}\right)R = 0, \tag{2.1.4}$$

katere rešitve so v splošnem sferne Besslove in Neumannove funkcije

$$R_l(\xi) = A j_l(\xi) + B n_l(\xi). \tag{2.1.5}$$

V našem problemu je koeficient $B = 0$, saj Neumannove funkcije divergirajo, ko se ξ približuje 0. Uporabimo le še robni pogoj $R_l(\xi = ka) = 0$ (neskončna potencialna jama) in dobimo

$$R_l(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = \alpha_l^{(n)}, \tag{2.1.6}$$

kjer je $\alpha_l^{(n)}$ n-ta ničla l-te sferne Besslove funkcije.

Tukaj imamo torej enačbo za lastne energije našega sistema, če upoštevamo definicijo za k končno dobimo

$$E_l^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\alpha_l^{(n)}\right]^2. \tag{2.1.7}$$

Koeficient A izračunamo, če radialni del valovne funkcije normiramo

$$|A|^{\,2} \int_0^a j_l\left(\alpha_l^{(n)}\frac{r}{a}\right) j_l\left(\alpha_l^{(n)}\frac{r}{a}\right) r^2 dr = 1. \tag{2.1.8}$$

Upoštevamo ortogonalnost sfernih Besslovih funkcij, ki se glasi[1]

$$\int_0^a j_l\left(\alpha_l^{(p)}\frac{r}{a}\right) j_l\left(\alpha_l^{(q)}\frac{r}{a}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{2}\left[j_{l+1}\left(\alpha_l^{(p)}\right)\right]^2 \delta_{pq} \tag{2.1.9}$$

in takoj lahko zapišemo normirano rešitev našega problema

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \left(\sqrt{\frac{a^3}{2}} j_{l+1}\left(\alpha_l^{(n)}\right)\right)^{-1} j_l\left(\alpha_l^{(n)}\frac{r}{a}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{2.1.10}$$

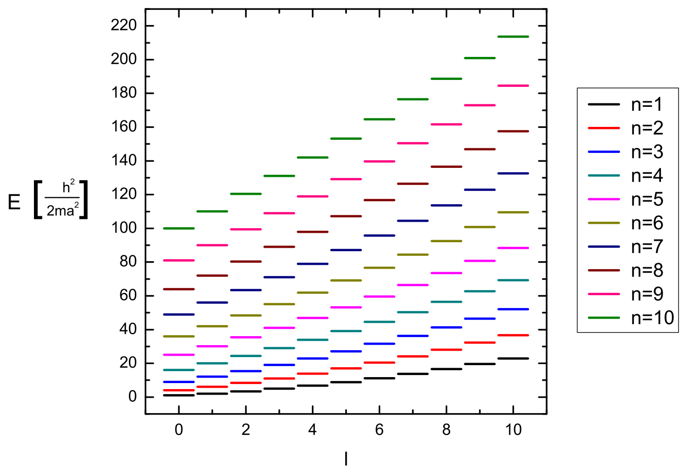
[1] Arfken, G. B. in Weber, H. J.:*Mathematical Methods for Physicists*, Fifth Edition, 2001 Harcourt/Academic Press

2.1.1 Grafični prikaz radialnega dela valovne funkcije

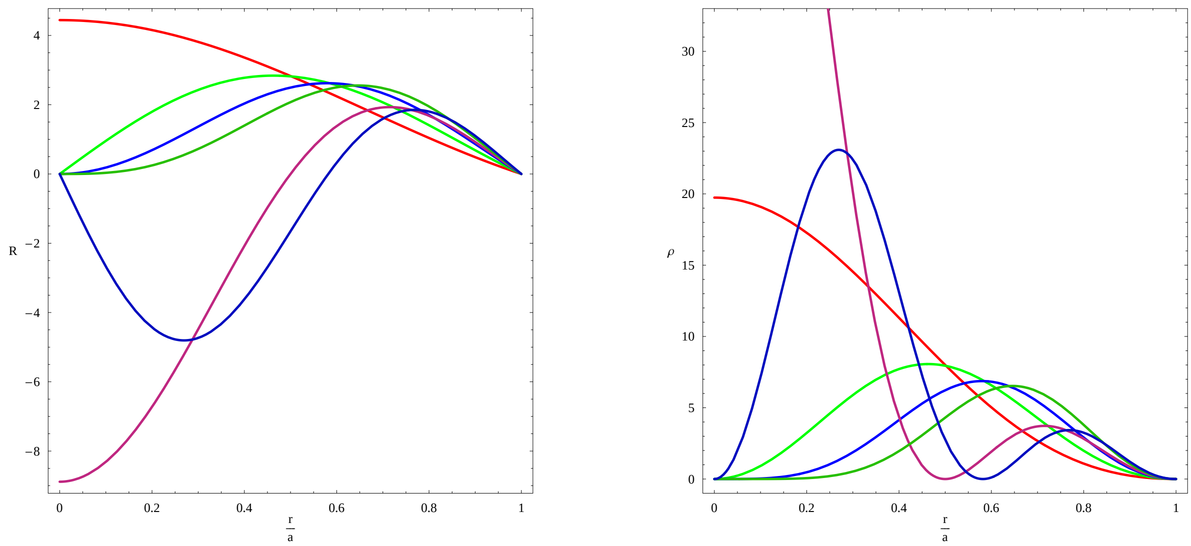
Najprej si poglejmo nekaj najnižjih lastnih energij sistema. Rezultate po enačbi (2.1.7) vidimo v tabeli (1).

#	(l,n)	$E_l^{(n)}\left[\frac{h^2}{2ma^2}\right]$
1	$(0,1)$	1.00000
2	$(1,1)$	2.04575
3	$(2,1)$	3.36564
4	$(0,2)$	4.00000
5	$(3,1)$	4.94764
6	$(1,2)$	6.04681
7	$(4,1)$	6.78390
8	$(2,2)$	8.38122
9	$(5,1)$	8.86878
10	$(0,3)$	9.00000

Tabela 1: Nekaj najnižjih lastnih energij obravnavanega sistema.



Slika 1: Slika prikazuje nekaj lastnih energij za različne vrednosti parov kvantnih števil l in n.



Slika 2: Na sliki levo vidimo nekaj prvih lastnih stanj radialnega dela valovne funkcije (v enotah $\sqrt{2a^{-3}}$), desno pa vidimo ustrezno verjetnostno gostoto $\rho = R^2$ (v enotah $2a^{-3}$). Barve ustrezajo sledečim stanjem: rdeča - $(0,1)$, svetlo zelena - $(1,1)$, svetlo modra - $(2,1)$, vijolična - $(0,2)$, temno zelena - $(3,1)$, temno modra - $(1,2)$.

2.2 Energija motenih stanj

Imamo enak problem, le da tokrat vklopimo še majhno električno polje $\mathcal{E}$. Zanima nas energija prvih štirih vzbujenih stanj.

Stanja z $l > 0$ so $2l+1$ degenerirana, saj obstajajo z lastno energijo $E_l^{(n)}$ lastna stanja z različnimi kvantnimi števili $m = -l, -l+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l-1, l$. Tako sta izmed prvih štirih osnovnih lastnih stanj drugo in tretje degenerirano. Zaradi sferne simetrije, lahko koordinatni sistem zasučemo, tako da kaže zunanje električno polje v smeri, ki nam najbolje ustreza z vidika izračuna. Postavimo torej koordinatni sistem tako, da zunanje električno polje kaže v smeri z-osi. Tako se nov hamiltonijan zapiše

$$H = H_0 - e\mathcal{E}z = H_0 - e\mathcal{E}r\cos\theta. \tag{2.2.1}$$

V nedegeneriranem primeru moramo uporabiti drugi red razvoja, saj je prvi v obeh primerih enak 0. Izkaže se, da so neničelni le členi, ki vsebujejo $\langle 1n0|r\cos\theta|010\rangle$ za 1. oziroma $\langle 1n0|r\cos\theta|020\rangle$ za 4. stanje. Tako dobimo popravka za energijo

$$E_1^2 = (e\mathcal{E})^2\frac{2ma^2}{\hbar^2}\sum_n \frac{|\langle 1n0|r\cos\theta|010\rangle|^2}{\left(\alpha_0^{(1)}\right)^2 - \left(\alpha_1^{(n)}\right)^2},$$
$$E_4^2 = (e\mathcal{E})^2\frac{2ma^2}{\hbar^2}\sum_n \frac{|\langle 1n0|r\cos\theta|020\rangle|^2}{\left(\alpha_0^{(2)}\right)^2 - \left(\alpha_1^{(n)}\right)^2}.$$

Dovolj dober rezultat dobimo, če upoštevamo le nekaj prvih členov (npr. prve tri). Popravka energiji se glasita

$$E_1^2 = U(2e\mathcal{E}a)^2\frac{2ma^2}{\hbar^2} \qquad U \approx -2.2712\cdot 10^{-3}$$
$$E_4^2 = W(2e\mathcal{E}a)^2\frac{2ma^2}{\hbar^2} \qquad W \approx -5.3773\cdot 10^{-3}$$

V primeru za stanji 2 in 3, kjer imamo opravka z degeneracijo, zapišemo matriko in jo diagonaliziramo. Pri tem naletimo na težavo, saj velja

$$-e\mathcal{E}\langle 11m|r\cos\theta|11m'\rangle \equiv 0$$
$$-e\mathcal{E}\langle 21m|r\cos\theta|21m'\rangle \equiv 0$$

tako da sta v obeh primerih matriki ničelni.