KVANTNA MEHANIKA 1

Domača naloga

Tone Rotar
Astronomsko- geofizikalna smer
Vpisna številka: 28010138

V nalogi bomo obravnavali kvantno piko kvadratne oblike z robom a, ki je kar dvodimenzionalna neskončna potencialna jama kvadrane oblike, se pravi:

$$V(x,y)=\begin{cases} V_0; x\in[0,a]\wedge y\in[0,a] \\ \infty; sicer \end{cases},$$

pravokotno nanjo pa pripnemo žico, katere potencial opišemo kot;

$$V'(x,y)=W_0\delta(x-x_0)\delta(y-y_0),$$

kjer sta x_0 in y_0 koordinati pritrdišča žice. Da bo žica sploh igrala kakšno vlogo, morata biti še izpolnjena pogoja $x_0\in[0,a]$ in $y_0\in[0,a]$.

Za končni izračun so podane še količine: $a=100nm$, $W_0=10^{-40}Jm^2$, $m_e=9.1\cdot10^{-31}kg$.

Naloga zahteva dve stvari:

1. V prvem redu perturbacijske teorije izračunaj premik energije osnovnega ter prvega vzbujenega (degeneriranega) stanja elektrona v piki zaradi vpliva žice v odvisnosti od točke, kamor žico priklopimo.
2. Kam moramo priklopiti žico, da bo prvo vzbujeno stanje v prvem redu perturbacije ostalo degenerirano?

Opomba: Nalogo smo reševali že na drugem kolokviju 23. maja 2006.

1. Premik energije osnovnega in prvega vzbujenega stanja elektrona

Valovne funkcije, ki opisujejo stanje elektrona v jami, kakršno imamo v naši nalogi, so:

$$\psi_{m,n}=\frac{2}{a}\sin(k_m x)\sin(k_n y); k_m=\frac{m\pi}{a}, k_n=\frac{n\pi}{a}; m,n\geq 1$$

Takšno obliko funkcije dobimo zlahka iz valovne funkcije za enodimenzionalno potencialno jamo, ki ima obliko:

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x)$$

Ker imamo dvodimenzionalno jamo, valovno funkcijo separiramo na produkt dveh funkcij; prva je odvisna samo od *x*, druga pa je odvisna samo od *y*. Lahko rečemo še $V_0 = 0$, s čimer si seveda olajšamo nadaljne računanje.

Naša valovna funkcija ima dve kvantni števili (*m* in *n*) in kot vemo degeneriranost pomeni vsaj dve različni stanji delca pri isti lastni energiji. Neperturbirane lastne energije zapišemo takole:

$$E_{m,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}\left(m^2 + n^2\right)$$

Če pa imamo perturbiran sistem, oziroma, če se odločimo obravnavati nek dodatni potencial kot motnjo, pa hamiltonjan zapišemo kot:

$$H = H_0 + V',$$

sam hamiltonjan pa, kot vemo, uporabimo v Schrödingerjevi enačbi kot:

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle$$

Ker imamo dve kvantni števili, računamo v matrični obliki. Glede na vzbujenost sistema določimo bazo. Za osnovno stanje elektrona je baza kar $\left|1{,}1\right\rangle$, za prvo vzbujeno (se pravi degenerirano) stanje pa je baza $\left|1{,}2\right\rangle$ in $\left|2{,}1\right\rangle$.

V osnovnem stanju je bazni vektor samo en, se pravi za računanje ne rabimo matrike, ampak samo skalar:

$$\left\langle 1{,}1\right|V'\left|1{,}1\right\rangle,$$

nemoten hamiltonjan pa je;

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{m_e a^2}.$$

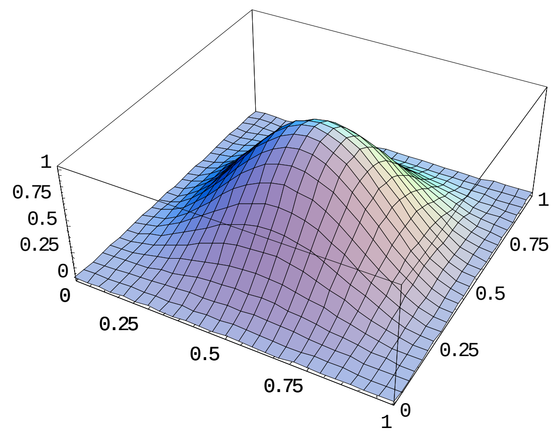
Motnje ni težko izračunati, saj integral vsebuje dve delta funkciji:

$$\left\langle 1{,}1\right|V'\left|1{,}1\right\rangle = W_0 \frac{4}{a^2}\int_0^a dx \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\left[\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)dy =$$

$$= W_0 \frac{4}{a^2}\int_0^a dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)\left[\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\right]dy =$$

$$= W_0 \frac{4}{a^2}\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{a}\right)$$

To je že popravek k energiji v odvisnosti od položaja žice. Nič ne bo škodovalo, če si pogledamo velikost motnje grafično:



Vidimo, da žica najbolj zmoti elektron, če jo postavimo na sredino kvantne pike.

V vzbujenem stanju je nemoteni hamiltonjan oblike:

$$H_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e a^2}\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix},$$

do matričnih elementov V' pa pridemo po postopku;

$$V_{11} = \langle 1,2|V'|1,2\rangle$$

$$V_{22} = \langle 2,1|V'|2,1\rangle$$

$$V_{12} = \langle 1,2|V'|2,1\rangle$$

$$V_{21} = \langle 2,1|V'|1,2\rangle$$

Integrali so podobni tistemu pri izračunu za osnovno stanje:

$$V_{11} = W_0 \frac{4}{a^2}\int_0^a dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)dy =$$

$$= W_0 \frac{4}{a^2}\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{a}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{a}\right)$$

$$V_{22} = W_0 \frac{4}{a^2}\int_0^a dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)dy =$$

$$= W_0 \frac{4}{a^2}\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{a}\right)$$

$$V_{12} = V_{21} = W_0 \frac{4}{a^2} \int_0^a dx \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy =$$

$$= W_0 \frac{4}{a^2} \sin\left(\frac{\pi x_0}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_0}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y_0}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y_0}{a}\right)$$

Lastne energije so lastne vrednosti in lastne funkcije so lastni vektorji matrike:

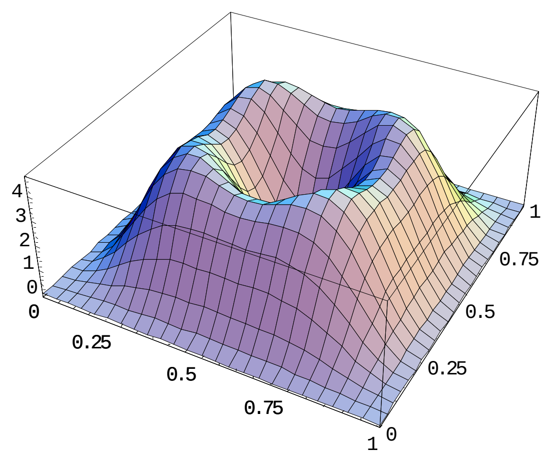
$$A = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}$$

Zanimajo nas popravki energij, se pravi lastne vrednosti matrike *A*:

$$\lambda_1 = 0$$

$$\lambda_2 = W_0 \frac{4}{a^2} \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y_0}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi x_0}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{a}\right) \right)$$

in grafično:



V tem primeru žica ne moti sistema, če jo postavimo kamorkoli na rob, ali če jo damo točno na sredino kvantne pike.

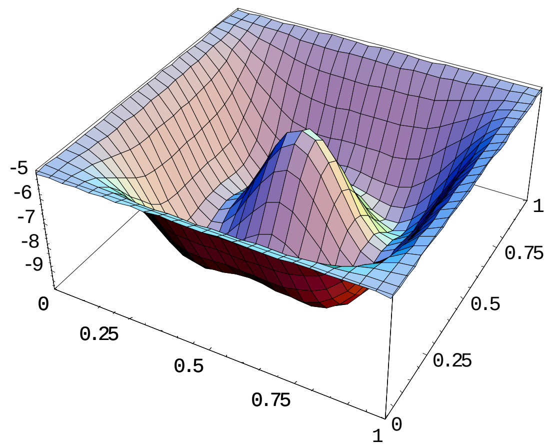
2. Degeneriranost prvega vzbujenega stanja

Degeneriranost pomeni to, da imamo ob eni in isti energiji vsaj dve različni stanji delca, ki sta seveda določeni z različnimi kvantnimi števili (v našem primeru imamo za vsako stanje dve kvantni števili). Celoten hamiltonjan je $H = H_0 + V'$. Matrika neperturbiranega hamiltonjana vsebuje samo dve enaki konstanti na diagonali. Lastne vrednosti so potemtakem:

$$\lambda_1 = C$$

$$\lambda_2 = -C - W_0 \frac{4}{a^2}\left(\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi x_0}{a}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{a}\right)\right);$$

$$C = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2m_2a^2}$$



Energije celotnega hamiltonjana

Prvi vzbujeni stanji sta degenerirani tam, kjer ostanejo energije klub perturbaciji enake osnovnemu hamiltonjanu H_0. Kot je razvidno že iz zadnje slike se to zgodi, če žico priklopimo točno na sredino ali kamorkoli na rob kvantne pike. To zlahka vidimo tudi iz izraza za λ_2; če sta x_0 ali y_0 enaka $0, a$ ali $\frac{a}{2}$, potem je lastna vrednost v vsakem primeru $-C$.