

Višečestična fizika na kvantnom prstenu

Mikoč, Luka

Master's thesis / Diplomski rad

2021

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:778039>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-24**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Luka Mikoč

Višečestična fizika na kvantnom prstenu

Diplomski rad

Zagreb, 2021.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ
FIZIKA I INFORMATIKA; SMJER NASTAVNIČKI

Luka Mikoč

Diplomski rad

**Višečestična fizika na kvantnom
prstenu**

Voditelj diplomskog rada: Prof. Dr. Sc. Robert Pezer

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2021.

Zahvale po potrebi. Ako zahvala nema ostaviti praznu stranicu.

Sažetak

Rad predstavlja nekoliko odabranih tema iz područja kvantnih prstenova koji opisuju neke značajke međudjelujućih višečestičnih sistema. U ovom radu predstavljamo fizičke značajke poput energijskih spektara gdje polazimo od prikaza u sistemima koje možemo promatrati kao jednočestične do nekoliko jednostavnih višečestičnih međudjelujućih primjera (uglavnom sistemi nekoliko čestica). Posebno prikazujemo utjecaj magnetskog polja na značajke kvantnih prstenova poput periodičnosti spektra, stalnih struja sve do jednočestičnih matrica gustoće (korelacije u sistemu). Posljednja cjelina u radu je prikaz nekoliko primjera neravnotežne kvantne dinamike modeliranjem vremenske evolucije sistema. U dodacima je pregled numeričkih metoda te izbor programske podrške razvijene za potrebe ovog rada.

Ključne riječi:

Kvantni prsten

Najniže energetske stanje

Reducirana matrica gustoće

Raspodjela po kutnoj količini gibanja

Struje

Gustoća vjerojatnosti

Vremenska evoluciju

Many-body physics in quantum ring

Abstract

The paper presents several selected topics from the field of quantum rings that describe some features of interacting multiparticle systems. In this paper, we present physical properties such as energy spectra where we start from representations in systems that can be viewed as single-particle to a few simple multi-particle interacting examples (mainly systems of several particles). In particular, we show the influence of the magnetic field on the physical properties of quantum rings such as the periodicity of the spectrum, persistent currents, and single-particle density matrices (correlations in the system). The last part of the paper present several examples of nonequilibrium quantum dynamics by modeling the time evolution of the system. The appendices provide an overview of numerical methods and a selection of software developed for the purposes of this paper.

Keywords :

- Quantum ring
- Lowest energy state
- Reduced density matrix
- Angular momentum distribution
- Currents
- Probability density
- Time evolution

Sadržaj

1	Uvod	1
2	1D-prsten slobodnih elektrona	4
2.1	”Yrast” stanja	7
2.2	Korelacije u sustavu N elektrona	7
2.3	Korelacija amplituda	9
3	Dvije čestice na prstenu s jakim kontaktnim međudjelovanjem	14
3.1	Korelacija amplituda	17
4	Elektron u magnetskom polju	22
4.1	Magnetsko polje i struje za elektrone na prstenu	24
4.2	Dva elektrona u magnetskom polju	27
4.3	Dva elektrona na prstenu u magnetskom polju	32
4.4	Korelacijska funkcija za dva međudjelujuća elektrona	39
4.5	Vremenska evolucija dva elektrona na prstenu u magnetskom polju . .	43
5	Zaključak	46
6	Metodički dio	47
6.1	Istraživački usmjerena nastav fizike	47
6.2	Sila na vodič kojim teče struja u magnetskom polju	48
	Dodaci	53
A	Matrica konačnih razlika	53
B	Programska podrška	54
C	Matematički izvodi	62
	Literatura	67

1 Uvod

Proizvodnja nanoprstenja zabilježila je golem napredak tijekom posljednjih desetljeća, a eksperimentalni fizičari su danas u mogućnosti realizirati nanoprstenje koje sadrži samo nekoliko elektrona [1]. Topologija prstena omogućava zanimljive višestručne učinke, a posebno je važno međudjelovanje s magnetskim poljima. Poznati primjer opažen eksperimentalno u kvantnim prstenovima je čuveni Aharonov Bohm učinak [2]. Nadalje, studija sistema ultrahladnih atoma koju su izveli Jimenez-Garcia i suradnici, pokazuje kako se Peierlsova supstitucija može realizirati na optičkim rešetkama [3]. Ova je studija učinila kvantne prstenove popularnim sustavom u kojem se eksperimentalno mogu istraživati temeljne značajke kvantne mehanike. Slijedom toga se posljednjih godina stalno povećava interes za teorijska i eksperimentalna proučavanja ovakvih mikroskopskih sistema. Pored spomenutog razloga za ovo zanimanje je nekoliko, a glavni su:

- Mogućnost kontrole broja čestica u prstenu i odgovarajućih fluktuacija
- Mogućnost proučavanja umjetnih atoma i njihovih značajki jer kvantni prstenovi i točke posjeduju spektralne značajke strukture ljuski sličnih stvarnim atomima
- Opažanje stalnih struja (čak i uz prisutnost nečistoća) kod kvantnih prstenova u okomitom magnetskom polju, vrlo često ugođenom tako da ima jakost nula na prstenu
- Precizna eksperimentalna realizacija teorijski zanimljivih mikrosistema kvantnih prstenova omogućena razvojem poluvodičke tehnologije

Cilj rada je predstaviti jednostavan teorijski uvod u kvantne prstenove koji ipak opisuje neke važne značajke uz poveznice prema eksperimentalnim realizacijama fenomena.

Neke značajke kvantnih prstenova se mogu objasniti teorijom jednog elektrona koja je u jednodimenzionalnim sustavima relativno jednostavna. Suprotno tome, problem mnoštva fermiona u jednodimenzionalnim sustavima iznenađujuće je kompliciran zbog presudnog utjecaja Paulijeveg principa isključenja. Općenito, korelacije su uvijek jake, a rezultiraju nefermionskim kvazičesticama kao nisko energijskim pobuđenjima. Zbog ovog fenomena jednodimenzionalni kvantni fermionski

sustavi nisu "Fermijeve tekućine" već "Luttingerove tekućine" sa specifičnim kolektivnim pobuđenjima. Teorijski pristup koji se obično koristi u proučavanju ovakvih 1D sistema često polazi od beskonačnog jednodimenzionalnog sustava dok je u malim konačnim prstenovima moguća izravna dijagonalizacija višečestičnog Hamiltonijana numeričkim tehnikama i reprezentacijom problema u prikladnoj bazi. Ako je moguće, egzaktni pristup je uvijek poželjna strategija koja pruža izravnu i potpunu fizičku informaciju koju teorija pruža. Primjera sistema gdje je to moguće je relativno malo, a kvantni prstenovi su jedni od najatraktivnijih.

Model za realizaciju konačnog kvantnog prstena pretpostavlja glatko zatočenje vanjskim potencijalom u obliku prstena u kojem se elektroni kreću tako da im je gibanje onemogućeno u radijalnom i smjeru z-osi (uzimamo standardni cilindrični koordinatni sustav s prstenom u xy ravnini). To se eksperimentalno postiže tako da je energija pobuđenja stanja povezanih s tim stupnjevima slobode znatno viša od dostupne u eksperimentima efektivno dajući dinamiku samo u smjeru kuta ϕ . U malom jednodimenzionalnom konačnom kvantnom prstenu višečestični spektar je moguće egzaktno odrediti. U praksi se koriste dvije porodice teorijskih modela:

1. kontinuirani model sa složenom valnom funkcijom koja opisuje međudjelujući sistem (kompleksna funkcija više varijabli), a međudjelovanje elektrona obično opisujemo standardnim Coulomb-ovom izrazom ($\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$)
2. diskretni model u kojem određeni broj čvorova na kružnici zaposjeda konačni broj elektrona uz uvažavanje ograničenja simetrije izmjene (Paulijeva principa) pri čemu je moguće preskakanje između čvorova¹

Kao što smo već napomenuli u slučaju malog broja elektrona (tipično $N < 10$) višečestični problem je dobro definiran i često ga je moguće riješiti egzaktno tehnikama numeričke dijagonalizacije za nekoliko najnižih energetske stanja. U ovom radu ću razmotriti i popularni model kod kvantnih prstenova s beskonačno jakim kontaktnim međudjelovanjem (matematički ga modeliramo tzv delta funkcijom), a mogu se promatrati i bozoni i fermioni te mješavine. Ključna razlika između bozona i fermiona je simetrija izmjene jednočestičnih kvantnih brojeva koja se preslikava na simetriju višečestične valne funkcija. Npr za elektrone zamjena spina i prostornih

¹Ovdje se najčešće uzima da je međudjelovanje prisutno samo za elektrone koji zaposjedaju isti čvor.

koordinata mijenja predznak valne funkcije dok za bozone ostaje nepromijenjena. Općenito prema kvantnoj teoriji polja, bozoni imaju cjelobrojni, a fermioni polucjelobrojni spin.

Cilj diplomskog rada je dati jednostavan teorijski uvod u kvantne prstenove koji opisuje neke višestručne značajke sistema nekoliko međudjelujućih čestica. Polazna točka opisa teorije kvantnih prstenova je najjednostavniji slučaj slobodnih elektrona bez spina. Nakon razvoja formalizma i predstavljanja osnovnih značajki sistema uvodimo kontaktno i općenito međudjelovanje u nekoliko specifičnih konfiguracija koje omogućavaju egzaktno rješavanje kvantno mehaničkoga problema. Posebno ćemo predstaviti fizičke značajke ovih sistema prikazom energijskih spektara u jednočestičnom i višestručnom formalizmu. Sljedeća tema proučavanja je učinak magnetskog toka kroz prsten na način da je magnetsko polje nula u blizini prstena bez prisustva nečistoća. Podrobno će se prikazati utjecaj magnetskog toka u ovoj konfiguraciji na periodičnosti spektra i stalnih struja ovisno o jakosti toka polja. Naime, u zatvorenom sistemu s konačnim brojem elektrona javlja se karakteristična spektralna periodičnost koju je moguće eksperimentalno mjeriti opažanjem prijenosa elektrona kvantnim prstenom u režimu Coulombske blokade². Prostorne korelacije u sistemima ćemo predstaviti izračunom jednočestične matrice gustoće, fizičke veličine koja bitno ovisi o jakosti međudjelovanja, prirodi čestica koje čine kvantni sistem te (bez)konačnosti prostora gibanja. Ova veličina je posebno prikladna pri opisu kvantne koherencije koja je važna u eksperimentima i praktičnoj primjeni kvantne teorije. Na kraju rada predstavljamo nekoliko primjera iz neravnotežne kvantne dinamike u računima vremenske evolucije sistema koji se početno nalaze u superpoziciji stacionarnih stanja.

²Coulombska blokada je pojava iščezavanja vodljivosti kroz kvantni prsten kao posljedica premale energije vanjske razlike električnoga potencijala za povlačenje dodatnog elektrona u prsten.

2 1D-prsten slobodnih elektrona

Sa stanovišta kvantne mehanike slučaj čestice na jednodimenzionalnom prstenu ima niz sličnosti s povezanim problemom čestice u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami. Hamiltonijan za slobodnu česticu koja je ograničena u gibanju na prsten je:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.1)$$

Kao i obično sistem je najelegantnije predstaviti u koordinatnom sustavu koji odgovara simetriji samog sistema. U ovom slučaju očiti izbor je polarni koordinatni sustav u kojem ćemo prvo opisati važne izraze za diferencijalne operatore koji su nužni za razvoj formalizma za opis ovog sistema. Koristeći polarne koordinate na jednodimenzionalnom prstenu polumjera R , operatori gradijenta ∇ i Laplacijana ∇^2 su u polarnom koordinatnom sustavu zadani sljedećim izrazima³:

$$\begin{aligned} \nabla &= \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{\phi} \\ \nabla^2 &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Uvrštavanjem (2.2) u (2.1) dobivamo Hamiltonov operator (energije) predstavljen u koordinatnom sustavu pogodnom za analitičku i numeričku analizu:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

koordinatu ρ možemo tretirati kao konstantu R jer je su u ovom sistemu čestice ograničene na jednodimenzionalni prsten polumjera R . Konačno možemo napisati izraz za Hamiltonijan na prstenu kao:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Ovdje ćemo slijediti razmatranja na način i uz oznake opisane u [4]. Jedina koordinata Hamiltonijana jedne čestice (elektrona) na prstenu je polarni kut ϕ .

³Ovi diferencijalni operatori se definiraju u Kartezijevom koordinatnom sustavu gdje su jedinični vektori konstantni.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

R je polumjer prstena, m_e je masa čestice, a \hbar je reducirana Planckova konstanta. Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba jedne čestice elektrona na prstenu nam daje sljedeća vlastita stanja i pripadne kvantizirane energije:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \frac{\partial^2 \psi(\phi)}{\partial \phi^2} = E\psi(\phi), \quad \psi_m(\phi) = \frac{1}{2\pi R} e^{im\phi}, \quad E = \varepsilon_m \quad (2.3)$$

pri čemu su odgovarajuće svojstvene vrijednosti energije:

$$\varepsilon_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2m_e R^2}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

dok je kutna količina gibanja dana s $m\hbar$. m su cijeli brojevi jer valna funkcija mora zadovoljiti uvjet jednoznačnosti na prstenu:

$$\psi_m(\phi) = \psi_m(\phi + 2\pi).$$

Bezdimenzionalnu vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu jedne čestice na prstenu dobivamo tako da jednadžbu (2.3) pomnožimo sa faktorom

$$\frac{2m_e R^2}{\hbar^2}$$

nakon čega Schrödingerova jednadžba ima oblik pogodan za fizičku analizu:

$$-\frac{\partial^2 \psi(\phi)}{\partial \phi^2} = \varepsilon \psi(\phi), \quad \varepsilon = \frac{2m_e R^2 E}{\hbar^2}$$

U slučaju slobodnih čestica kvantno stanje više fermiona opisano je Slater-ovom determinantom koja osigurava ispravnu simetriju izmjene jednočestičnih koordinata (i položaja i spina)

$$\psi(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{m_1}(\phi_1) & \psi_{m_2}(\phi_1) & \cdots & \psi_{m_N}(\phi_1) \\ \psi_{m_1}(\phi_2) & \psi_{m_2}(\phi_2) & \cdots & \psi_{m_N}(\phi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m_1}(\phi_N) & \psi_{m_2}(\phi_N) & \cdots & \psi_{m_N}(\phi_N) \end{vmatrix}. \quad (2.4)$$

U slučaju N polariziranih elektrona istog spina⁴ $S_z = \uparrow$ ukupna kutna količina gibanja je dana s:

$$M = \sum_i^N m_i$$

, a ukupna energija s:

$$E = \sum_i^N \varepsilon_{m_i}.$$

U sustavu više elektrona najniže energetske stanje, tzv *yrast* stanje, određene ukupne kutne količine gibanja se postiže uzastopnim zauzimanjem jednočestičnih stanja od najnižeg stanja na više. Ovdje je praktično uvesti "kompaktna stanja" u kojima elektroni redom popunjavaju jednočestična kvantna stanja od odabranog m_0 do $m_0 + N - 1$. Ukupna kutna količina gibanja u tom stanju je

$$M = \sum_{i=0}^{N-1} (m_0 + i) = Nm_0 + \frac{N(N-1)}{2}$$

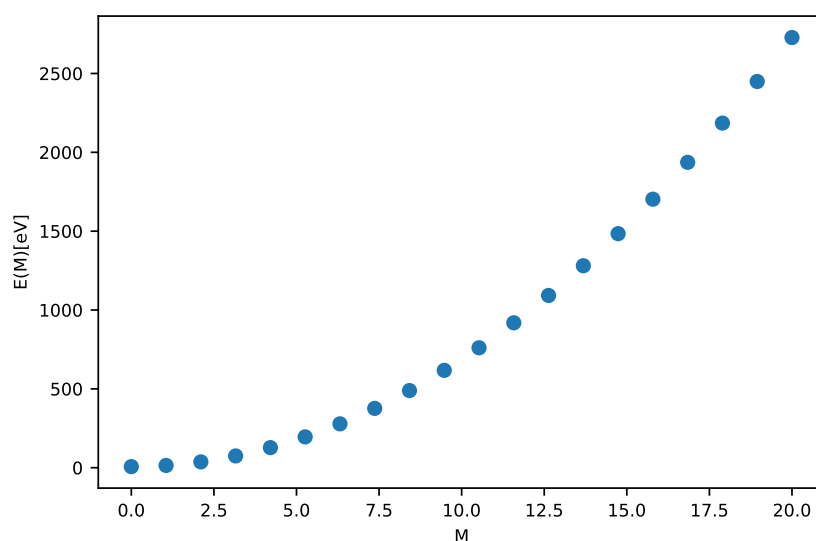
i ukupna energija:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \sum_{i=0}^{N-1} (m_0 + i)^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} (Nm_0^2 + m_0(N^2 - N) + \frac{2N^3 - 3N^2 + N}{6}).$$

$$E(M) = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \left(N \left(\frac{M}{N} - \frac{N-1}{2} \right)^2 + \left(\frac{M}{N} - \frac{N-1}{2} \right) (N^2 - N) + \frac{2N^3 - 3N^2 + N}{6} \right) \quad (2.5)$$

gdje je $E(M)$ najniže energetske stanje, ili *yrast* stanje, određene ukupne kutne količine gibanja M za N elektrona. "Nekompaktna stanja" su ostala kod kojih elektroni redom ne popunjavaju jednočestična kvantna stanja, odnosno, gdje postoje nezaposjednuta kvantna stanja između popunjenih.

⁴To je kao da promatramo slučaj fermiona bez spina.



Slika 2.1: Najniža energija, ili *yrast* stanje, dva elektrona bez međudjelovanja za određene ukupne kutne količine gibanja

2.1 "Yrast" stanja

U sustavu dva ne međudjelujuća elektrona *yrast* stanje, odnosno najniže energetske stanje određene ukupne kutne količine gibanja $E(M)$ je prikazano na slici 2.1 na kojoj se energetske stanje $E(M)$ računa prema formuli:

$$E(M) = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \left(2 \left(\frac{M}{2} - \frac{1}{2} \right)^2 + 2 \left(\frac{M}{2} - \frac{1}{2} \right) + 1 \right)$$

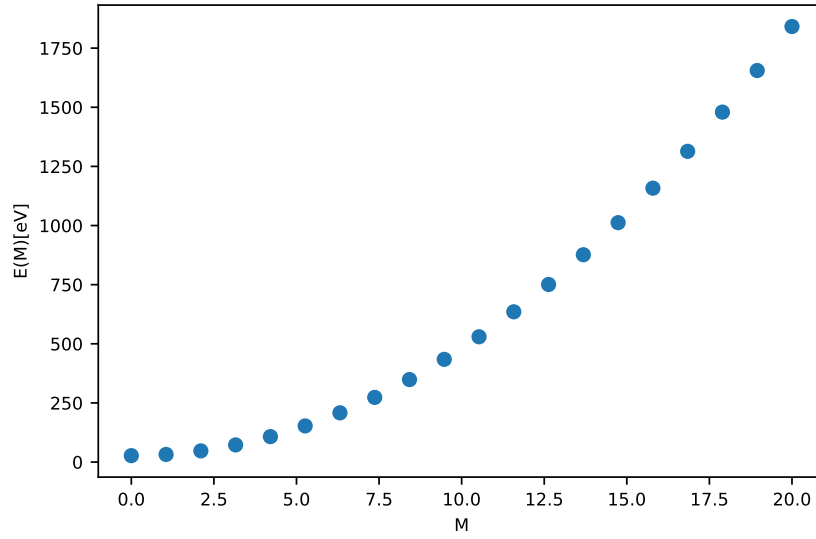
koju dobivamo uvrštavanjem $N = 2$ u (2.5).

U sustavu tri slobodna elektrona *yrast* stanje za određene ukupne kutne količine gibanja $E(M)$ je prikazano na slici 2.2. Gdje energetske stanje $E(M)$ za $N = 3$ iznosi:

$$E(M) = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \left(3 \left(\frac{M}{3} - 1 \right)^2 + 6 \left(\frac{M}{3} - 1 \right) + 5 \right)$$

2.2 Korelacije u sustavu N elektrona

k -čestična reducirana matrica gustoće je fizička observabla koja nam daje uvjetnu vjerojatnost prisustva k elektrona u prostorno vremenskim točkama. Najjednostavnija je jednočestična korelacijska funkcija u sustavu N elektrona, bez spina, koju na



Slika 2.2: Najniža energija, ili *yrast* stanje, tri elektrona bez međudjelovanja za određene ukupne kutne količine gibanja

prstenu definiramo sa sljedećim izrazom

$$\rho(\phi', \phi) = N \int \cdots \int_0^{2\pi} \psi^*(\phi', \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N) \psi(\phi, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N) d\phi_2 d\phi_3 \dots d\phi_N. \quad (2.6)$$

gdje nam je s ψ označena višečestična valna funkcija sistema. Primijetimo da nedijagonalni članovi u ovom izrazu mogu biti kompleksni. Ovdje promatramo isti trenutak t tako da ne gledamo korelacije u različitim trenucima.

Uvrštavanjem valne funkcije u (2.6) nakon provedene višedimenzionalne integracije dobivamo jednočestičnu korelacijsku funkciju N slobodnih elektrona

$$\rho(\phi', \phi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N (e^{i(m_j(\phi - \phi'))}). \quad (2.7)$$

Primijetimo da je ovako definirana jednočestična matrica gustoće normirana na ukupni broj čestica:

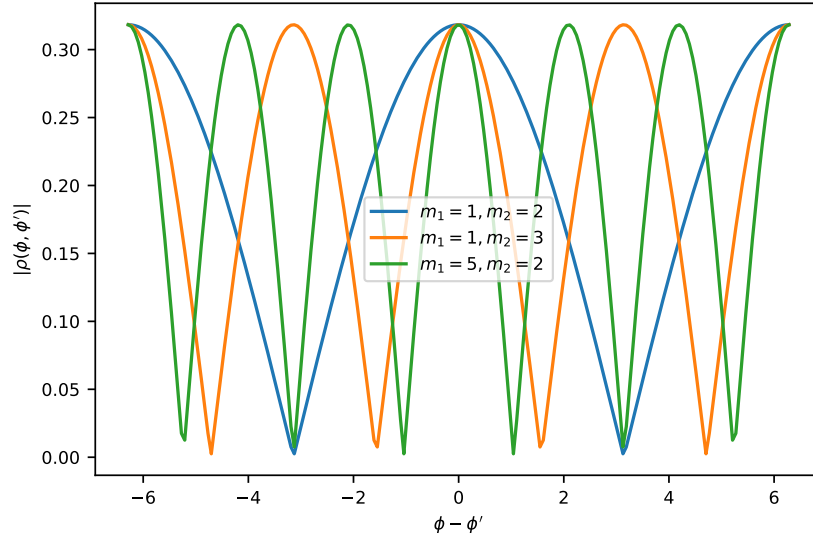
$$\int_0^{2\pi} d\phi \rho(\phi, \phi) = N$$

U sljedećem odjeljku ćemo pokazati na primjerima s 2 i 3 čestice praktične izračune ove veličine.

2.3 Korelacija amplituda

U sustavu dva slobodna elektrona ($N = 2$) jednočestična korelacijska funkcija prikazana je na slici 2.3:

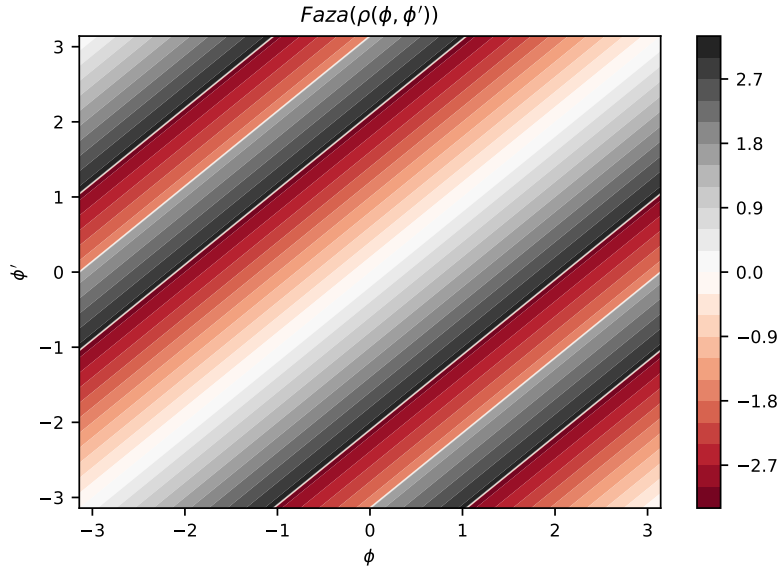
$$\rho(\phi', \phi) = \frac{1}{2\pi} (e^{i(m_1(\phi-\phi'))} + e^{i(m_2(\phi-\phi'))}).$$



Slika 2.3: Apsolutna vrijednost jednočestične korelacijske funkcije elektrona u sustavu dva elektrona

U sustavu tri slobodna elektrona $N = 3$ višečestična valna funkcija se dobiva pomoću Slater-ove determinante definirane u izrazu (2.4). U ovom slučaju praktično je raspisati izraze jer se nakon toga može uočiti formalna struktura koja omogućava analitički izračun:

$$\begin{aligned} \psi(\phi_1, \phi_2, \phi_3) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{m_1}(\phi_1) & \psi_{m_2}(\phi_1) & \psi_{m_3}(\phi_1) \\ \psi_{m_1}(\phi_2) & \psi_{m_2}(\phi_2) & \psi_{m_3}(\phi_2) \\ \psi_{m_1}(\phi_3) & \psi_{m_2}(\phi_3) & \psi_{m_3}(\phi_3) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{m_1}(\phi_1)\psi_{m_2}(\phi_2)\psi_{m_3}(\phi_3) - \psi_{m_2}(\phi_3)\psi_{m_3}(\phi_2)\psi_{m_1}(\phi_1) \\ &\quad - \psi_{m_1}(\phi_2)\psi_{m_3}(\phi_3)\psi_{m_2}(\phi_1) + \psi_{m_1}(\phi_3)\psi_{m_3}(\phi_2)\psi_{m_2}(\phi_1) \\ &\quad + \psi_{m_1}(\phi_2)\psi_{m_2}(\phi_3)\psi_{m_3}(\phi_1) - \psi_{m_1}(\phi_3)\psi_{m_2}(\phi_2)\psi_{m_3}(\phi_1)) \end{aligned}$$



Slika 2.4: Faza jednočestične korelacijske funkcije elektrona u sustavu dva elektrona gdje su $m_1 = 1, m_2 = 2$

Korelacija amplituda jednog elektrona u sustavu tri elektrona je dana s

$$3 \iint_0^{2\pi} \psi^*(\phi', \phi_2, \phi_3) \psi(\phi, \phi_2, \phi_3) d\phi_2 d\phi_3 = \rho(\phi', \phi).$$

Korelaciju izračunavamo pomoću svojstva međusobne ortogonalnosti funkcija $\psi_m(\phi)$ i $\psi_{m'}(\phi)$ koja osigurava preklop između jednočestičnih funkcija 0 ukoliko vrijedi $m \neq m'$

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \psi_{m'}^*(\phi) \psi_m(\phi) d\phi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\cos((m-m')\phi) + i \sin((m-m')\phi)) d\phi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{m-m'} \sin((m-m')2\pi) - \frac{1}{m-m'} (\cos((m-m')2\pi) - 1) \right) = 0. \end{aligned}$$

Na kraju dobivamo jednočestičnu korelacijsku funkciju u sustavu tri elektrona koja je prikazana na slici 2.5:

$$\rho(\phi', \phi) = \frac{1}{2\pi} (e^{i(m_1(\phi-\phi'))} + e^{i(m_2(\phi-\phi'))} + e^{i(m_3(\phi-\phi'))}).$$

koja je specijalni slučaj općeg izraza koji smo izveli, a nalazi se u jednadžbi (2.7).

Slike 2.3 i 2.5 prikazuju apsolutnu vrijednost jednočestične matrice gustoće u

sustavima od dva i tri elektrona. Dok slike 2.4 i 2.6 prikazuju fazu jednočestične matrice gustoće u sustavima od dva i tri elektrona.

Jednočestična matrica gustoće (bez vremenskih korelacija, dakle u odabranom trenutku t) omogućava računanje raspodjele po kutnoj količini gibanja prema sljedećem izrazu

$$n(l_z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' d\phi e^{il_z(\phi' - \phi)} \rho(\phi', \phi; t) \quad (2.8)$$

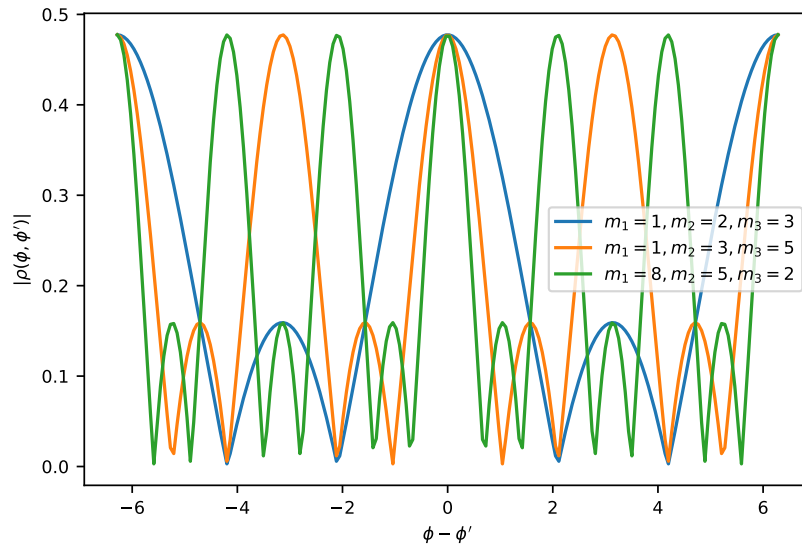
gdje smo iskoristili standardni izraz za operator kutne količine gibanja:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.9)$$

U slučaju slobodnih fermiona jednočestičnu matricu gustoće (2.7) je moguće analitički izračunati, a korištenjem definicije (2.8) imamo:

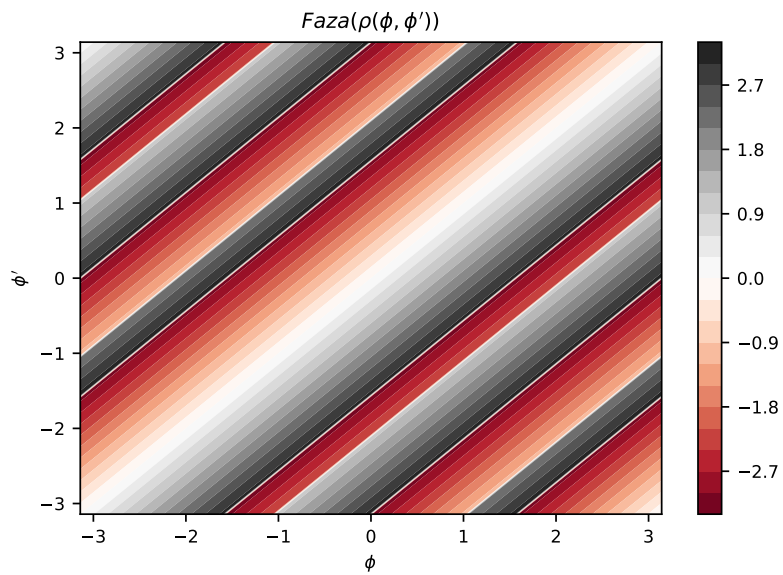
$$n(l_z) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{j=1}^N \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' d\phi e^{il_z(\phi' - \phi)} e^{i(m_j(\phi - \phi'))} = \sum_{j=1}^N \delta_{l_z, m_j} \quad (2.10)$$

što znači da je raspodjela 1 za svaki $l_z = m_j$ što je intuitivno i očekivani rezultat. Pri tome vrijedi normiranje $N = \sum_{l_z=-\infty}^{\infty} n(l_z)$.

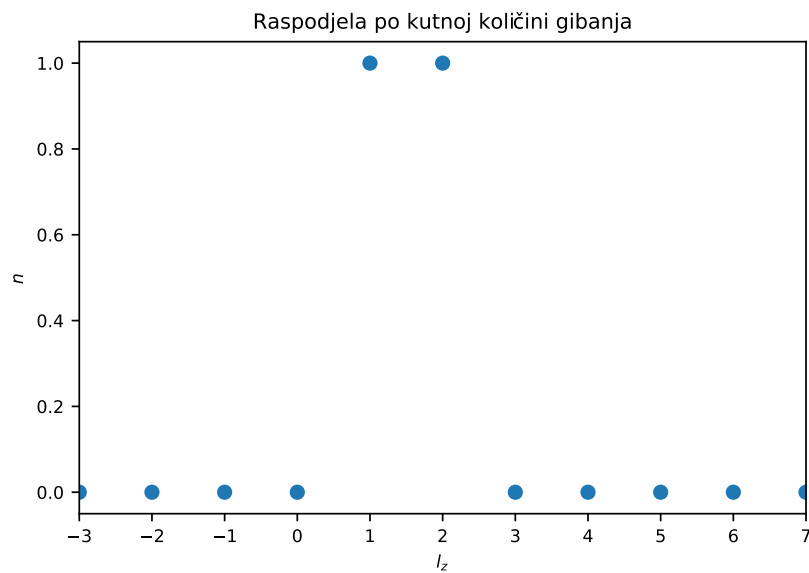


Slika 2.5: Apsolutna vrijednost jednočestične korelacijske funkcije elektrona u sustavu tri elektrona

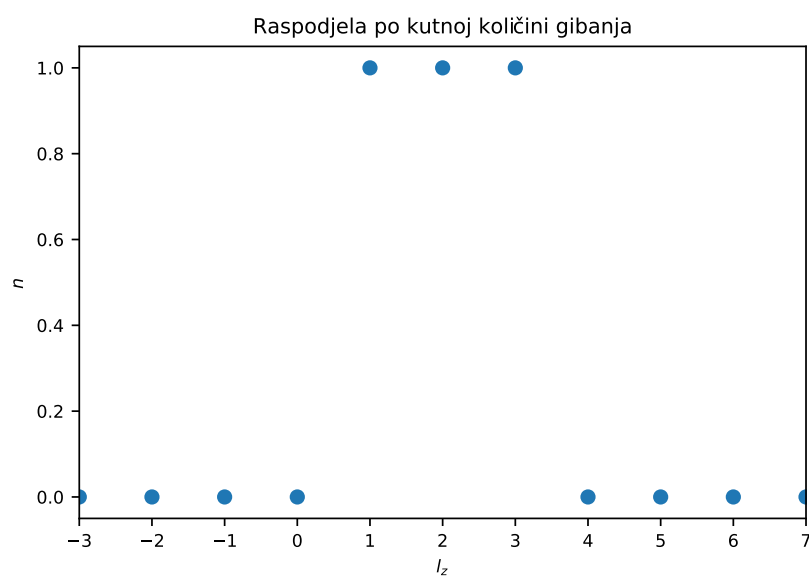
Slike 2.7 i 2.8 prikazuju raspodjelu po kutnoj količini gibanja u sustavima od dva i tri elektrona.



Slika 2.6: Faza jednočestične korelacijske funkcije elektrona u sustavu tri elektrona gdje su $m_1 = 1, m_2 = 2, m_3 = 3$



Slika 2.7: Raspodjela po kutnoj količini gibanja u sustavu dva elektrona gdje su $m_1 = 1, m_2 = 2$



Slika 2.8: Raspodjela po kutnoj količini gibanja u sustavu tri elektrona gdje su $m_1 = 1, m_2 = 2, m_3 = 3$

3 Dvije čestice na prstenu s jakim kontaktnim međudjelovanjem

Dvije čestice na prstenu ograničene na beskonačno uski prsten uz beskonačno jako odbojno međudjelovanje kontaktnog oblika opisano δ -funkcijom. Čestice mogu biti bozoni ili potpuno polarizirani elektroni [5]. Hamiltonijan za dvije čestice na prstenu je ($\hbar = m = 1$)

$$H_2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial\phi_2^2}\right) + g_\infty\delta(\phi_1 - \phi_2),$$

gdje je ϕ koordinata duž prstena. Zbog praktičnosti biramo da je $R = 1$ i zbog toga se ϕ može smatrati kutom između 0 i 2π . Pretpostavljamo da je $g_\infty \rightarrow \infty$, tako da je valna funkcija nula kada je $\phi_1 = \phi_2$ (za fermione je ovaj uvjet automatski zadovoljen zbog Paulijevog principa) [5]. Zamjenom varijabli $u = \phi_1 - \phi_2$ i $v = (\phi_1 + \phi_2)/2$ dobivamo

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial\phi_1^2} &= \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{\partial^2}{\partial v\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial\phi_2^2} &= \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{\partial^2}{\partial v\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} \\ H_2 &= -\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2}\right) + g_\infty\delta(u). \\ -\left(\frac{\partial^2\psi(u,v)}{\partial u^2} + \frac{\partial^2\psi(u,v)}{\partial v^2}\right) + g_\infty\delta(u)\psi(u,v) &= E\psi(u,v)\end{aligned}\quad (3.1)$$

diferencijalnu jednadžbu pojednostavljujemo razdvajanjem varijabli standardnim postupkom kada je to moguće tako da dobivamo dvije jednostavnije za rješavanje:

$$\begin{aligned}\psi(u,v) &= \phi(u)G(v) \\ -\frac{1}{\phi(u)}\frac{d^2\phi(u)}{du^2} - \frac{1}{4}\frac{1}{G(v)}\frac{d^2G(v)}{dv^2} + g_\infty\delta(u) - E &= 0 \\ \frac{1}{4}\frac{1}{G(v)}\frac{d^2G(v)}{dv^2} &= -\lambda \\ -\frac{1}{\phi(u)}\frac{d^2\phi(u)}{du^2} - E &= -\lambda, u \neq 0.\end{aligned}$$

Rješenje jednadžbe (3.1) je

$$\psi(u, v) = B(u) \sin\left(\frac{nu}{2}\right) e^{imv},$$

gdje je B djelomično konstantna funkcija potrebna za bozone [5]. Periodični rubni uvjet glasi $\psi(u, v) = \psi(u, v + 2\pi)$ što je moguće ispuniti samo kada je m cijeli broj. Uvjet $\psi(0, v) = \psi(2\pi, v) = 0$ uvjetuje da je n pozitivni cijeli broj [5]. Koristeći originalne koordinate možemo napisati valnu funkciju kao

$$\psi(\phi_1, \phi_2) = B(\phi_1 - \phi_2) \sin\left(\frac{n(\phi_1 - \phi_2)}{2}\right) e^{\frac{im(\phi_1 + \phi_2)}{2}}. \quad (3.2)$$

Prvo razmatramo fermione. U ovom slučaju funkcija B nije potrebna (ili $B(u) \equiv 1$) pošto je valna funkcija već antisimetrična s obzirom na promjenu koordinata. Imamo dodatni uvjet periodičnosti za fermione $\psi(\phi_1, \phi_2) = \psi(\phi_1 + 2\pi, \phi_2) = \psi(\phi_1, \phi_2 + 2\pi)$, koji je ispunjen samo ako je $n + m$ paran [5]. U ovom slučaju možemo vidjeti da je rješenje jedna Slater-ova determinanta (2.4)

$$\begin{aligned} \sin\left(\frac{n}{2}(\phi_1 - \phi_2)\right) &= \frac{e^{i\frac{n}{2}(\phi_1 - \phi_2)} - e^{-i\frac{n}{2}(\phi_1 - \phi_2)}}{2}, \\ \psi(\phi_1, \phi_2) &\propto e^{i\frac{m+n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m-n}{2}\phi_2} - e^{i\frac{m-n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m+n}{2}\phi_2}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

koje se sastoji od jednočestičnih stanja s cjelobrojnim kutnim količinama gibanja $(m + n)/2$ i $(m - n)/2$ [5]. U slučaju bozona simetrija izmjene zahtjeva nepromjenljivost valne funkcije s obzirom na zamjenu jednočestičnih stupnjeva slobode (npr položaj i spin). To se može osigurati s djelomično kontaktnom funkcijom B koja ima stalnu vrijednost gotovo svugdje, ali mijenja predznak za $\phi_1 - \phi_2 = 2\pi k$ gdje je k cijeli broj [5]. Diskontinuitet funkcije B u tom slučaju nije problem za fizičku interpretaciju valne funkcije jer je u tom slučaju ona nula zbog sinusne funkcije [5]. Funkcija B koja ispunjava ove zahtjeve je kvadratni val $B(u) = \text{sgn}(\sin(u/2))$ (Slika 3.1). Dodatni uvjet periodičnosti za bozone $\psi(\phi_1, \phi_2) = \psi(\phi_1 + 2\pi, \phi_2)$ je ispunjen ako je $n + m$ neparan [5]. Konačno za bozone imamo

$$\psi(\phi_1, \phi_2) \propto \text{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right)\right) (e^{i\frac{m+n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m-n}{2}\phi_2} - e^{i\frac{m-n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m+n}{2}\phi_2}). \quad (3.4)$$

Općenito sada možemo pisati svojstvene vrijednosti za dvo-čestični sustav s beskonačno jakom kontaktnom interakcijom [5] kao

$$\epsilon_{m,n} = \frac{1}{4}(n^2 + m^2)$$

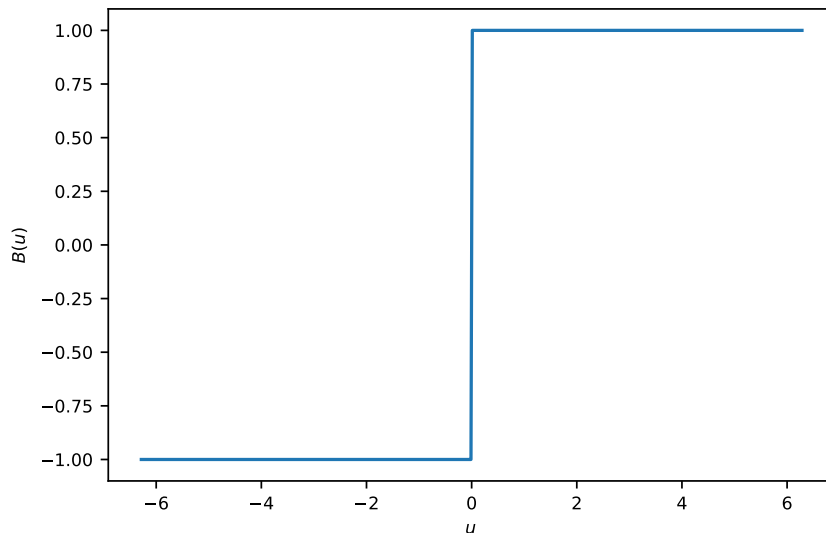
gdje $n + m$ mora biti paran za fermione i neparan za bozone [5]. Ukupna kutna količina gibanja stanja je m [5], jer

$$\frac{\partial}{\partial \phi_1} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial}{\partial u}$$

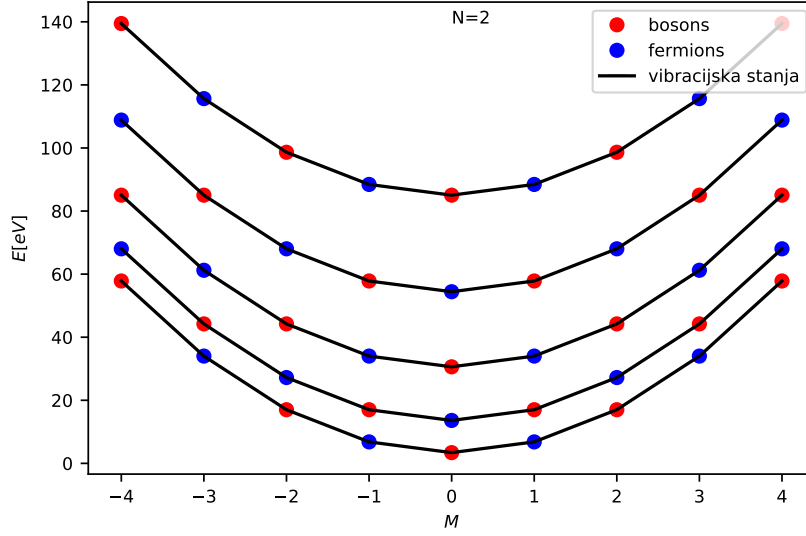
$$\frac{\partial}{\partial \phi_2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v} - \frac{\partial}{\partial u}$$

$$\hat{L}\psi = -i\left(\frac{\partial}{\partial \phi_1} + \frac{\partial}{\partial \phi_2}\right)\psi = -i\frac{\partial}{\partial v}\psi = m\psi.$$

Valna funkcija se sastoji od unutarnjeg izraza, $\sin(\frac{nu}{2})$ i izraza za centar mase e^{imv} . Izraz za centar mase odgovara krutom okretanju dvočestičnog sustava, dok unutarnji izraz odgovara unutarnjem vibracijskom stanju. Čisto rotacijska stanja ($n = 1$) dopuštena su samo za fermione s neparnom kutnom količinom gibanja, a za bozone samo za parne kutne količine gibanja [5]. Slika 3.2 prikazuje energijske spektre koji prikazuju izmjenično dopušteno stanje fermiona i bozona za svako vibracijsko stanje.



Slika 3.1: "Step" funkcija $B(u)$ koja osigurava ispravnu simetriju ukupne višečestične valne funkcije.



Slika 3.2: Energetski spektri za dva fermiona (plava) i za dva bozona koji su u interakciji s beskonačno jakom delta funkcijom (crvena).

3.1 Korelacija amplituda

U sustavu dva polarizirana fermiona istog spina $N = 2$ s beskonačno jakom odbojnom interakcijom koja ima oblik δ -funkcije valna funkcija ima oblik (3.3). Dok normalizirana valna funkcija sustava ima oblik

$$\psi_{m,n}(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{\pi\sqrt{8}} (e^{i\frac{m+n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m-n}{2}\phi_2} - e^{i\frac{m-n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m+n}{2}\phi_2}) \quad m \neq n.$$

Korelacija amplituda jednog fermiona (bozona) u sustavu dva fermiona (bozona) je

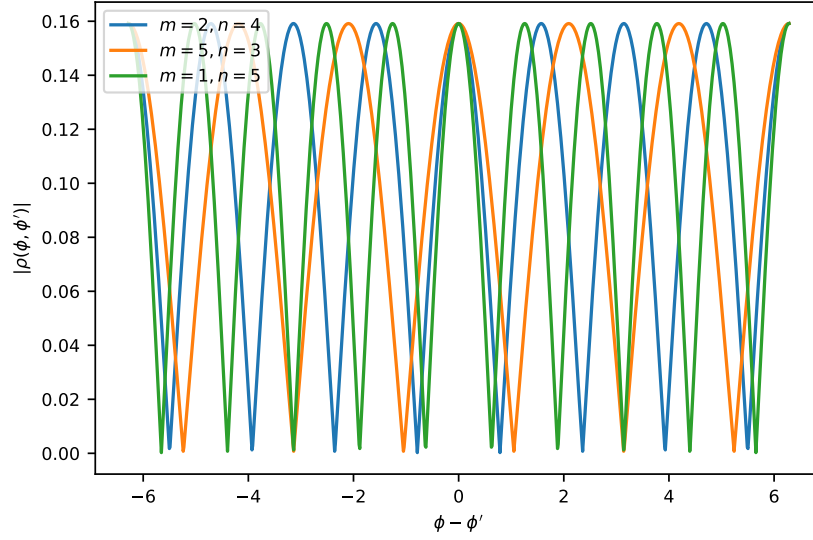
$$\rho_{m,n}(\phi', \phi) = 2 \int_0^{2\pi} d\phi_2 \psi_{m,n}^*(\phi', \phi_2) \psi_{m,n}(\phi, \phi_2). \quad (3.5)$$

Izračunom izraza (3.5) dobivamo u slučaju fermiona

$$\rho_{m,n}(\phi', \phi) = \frac{1}{2\pi} (e^{i\frac{m+n}{2}(\phi-\phi')} + e^{i\frac{m-n}{2}(\phi-\phi')}) = \frac{1}{\pi} e^{i\frac{m}{2}(\phi-\phi')} \cos\left(\frac{n}{2}(\phi-\phi')\right) \quad m \neq n.$$

gdje smo uvažili Paulijev princip isključenja (dva fermiona ne mogu imati iste jednočestične kvantne brojeve).

U sustavu polariziranih bozona istog spina $N = 2$ s beskonačno jakom odbojnom



Slika 3.3: Apsolutna vrijednost jednočestične korelacijske funkcije fermiona u sustavu dva fermiona

interakcijom koja ima oblik δ -funkcije valna funkcija ima oblik (3.4). Dok normalizirana valna funkcija sustava ima oblik

$$\psi_{m,n}(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{\pi\sqrt{8}} \text{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right)\right) (e^{i\frac{m+n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m-n}{2}\phi_2} - e^{i\frac{m-n}{2}\phi_1} e^{i\frac{m+n}{2}\phi_2}) =$$

$$\frac{i}{\pi\sqrt{2}} \text{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right)\right) e^{i\frac{m}{2}(\phi_1 + \phi_2)} \sin\left(\frac{n}{2}(\phi_1 - \phi_2)\right). \quad (3.6)$$

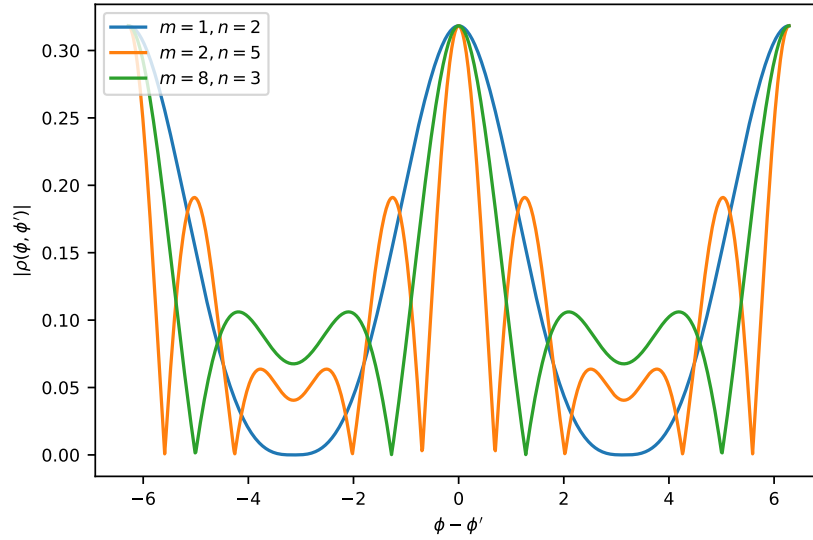
Korelacija amplituda u sustavu dva bozona korištenjem izraza (3.5) je dana s:

$$\rho_{m,n}(\phi, \phi') = \rho_{m,n}(\phi', \phi)^* =$$

$$\frac{1}{\pi^2} e^{im\frac{\phi' - \phi}{2}} \left[(\pi + \phi - \phi') \cos\left(n\frac{\phi' - \phi}{2}\right) + \frac{2}{n} \sin\left(n\frac{\phi' - \phi}{2}\right) \right] \quad \phi < \phi'$$

Gdje vidimo da je korelacijska funkcija ovisna samo o razlici kuta $\Delta\phi = \phi' - \phi$ kao što i očekujemo na osnovu simetrije sistema. Prema tome možemo ju izraziti preko razlike ($m + n$ je neparan za bozone) koordinata:

$$\rho_{m,n}(\Delta\phi) = \rho_{m,n}(-\Delta\phi)^* = \frac{1}{\pi^2} e^{i\frac{m}{2}\Delta\phi} \begin{cases} [(\pi - \Delta\phi) \cos(n\frac{\Delta\phi}{2}) + \frac{2}{n} \sin(n\frac{\Delta\phi}{2})] & \Delta\phi \geq 0 \\ [(\pi + \Delta\phi) \cos(n\frac{\Delta\phi}{2}) - \frac{2}{n} \sin(n\frac{\Delta\phi}{2})] & \Delta\phi < 0 \end{cases} \quad (3.7)$$



Slika 3.4: Apsolutna vrijednost jednočestične korelacijske funkcije bozona u sustavu dva bozona

U slučaju dva fermiona s jakim kontaktnim međudjelovanjem raspodjelu po kutnoj količini gibanja je moguće analitički izračunati korištenjem definicije (2.8):

$$n_F(l_z; n, m) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' d\phi e^{il_z(\phi' - \phi)} (e^{i\frac{m+n}{2}(\phi - \phi')} + e^{i\frac{m-n}{2}(\phi - \phi')}) = \delta_{l_z, \frac{m+n}{2}} + \delta_{l_z, \frac{m-n}{2}}$$

U slučaju dva bozona raspodjela po kutnoj količini gibanja je nakon analitičke integracije ukoliko $2l + m \neq |n|$:

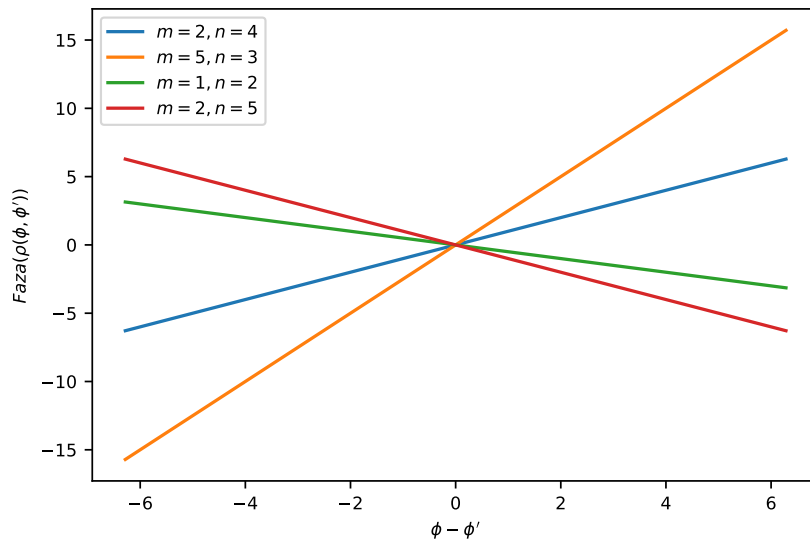
$$\frac{4(((2l + m)^2 - n^2)((2l + m)^2 + 5n^2)\pi + (-1)^{m+n}(((2l + m)^4 - n^4)\pi \text{Cos}[2l\pi]))}{((2l + m)^2 - n^2)^3 \pi^3} \quad \frac{16(2l + m)n^2 \text{Sin}[2l\pi]}{((2l + m)^2 - n^2)^3 \pi^3}$$

Podsjetimo se uvjeta simetrije izmjene koji, u ovom slučaju, postavlja ograničenje tako da je $n + m$ obavezno neparan. Korištenjem ovog uvjeta na kvantne brojeve možemo pojednostaviti gornji izraz:

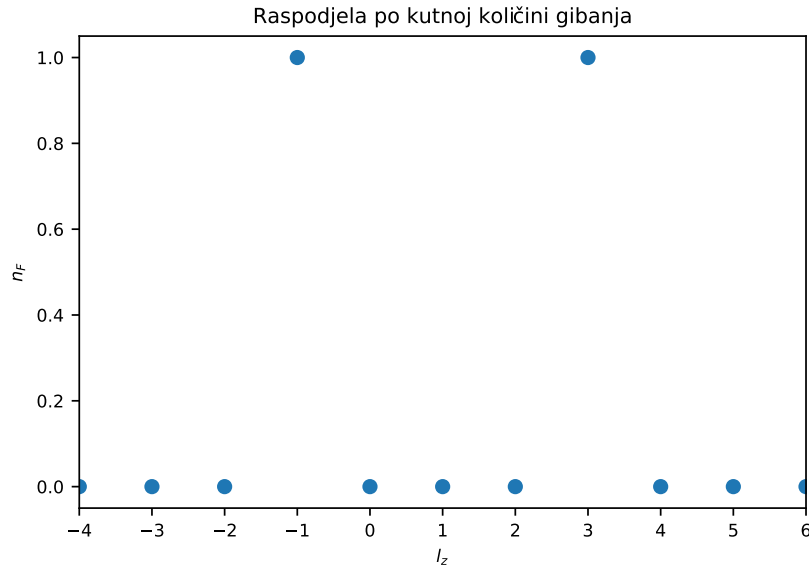
$$n_B(l; n, m) = \frac{8}{\pi^2} \begin{cases} \frac{2n^2 + [(2l+m)^2 + n^2] \sin^2(l\pi)}{[(2l+m)^2 - n^2]^2} + \frac{8(2l+m)n^2 \sin(2l\pi)}{\pi[(2l+m)^2 - n^2]^3} & 2l + m \neq |n| \\ \frac{1}{2n^2} + \frac{\pi^2}{24} & 2l + m = |n| \end{cases} \quad (3.8)$$

Slike 3.6 i 3.7 prikazuju raspodjelu po kutnoj količini gibanja u sustavima dva bozona i fermiona definirane s pomoću jednočestične matrice gustoće prema (2.8). Kvantni broj m u kontekstu ovih sistema je povezan s vrtnjom dvočestičnog sustava kao cjeline, a n s unutarnjim vibracijskim stanjima. Ovo se jasno vidi i iz strukture višestetične valne funkcije (3.2) za oba sistema. Na slici 3.7 različite vrijednosti m odgovaraju pomaku raspodjele (i naravno vrha) duž l osi.

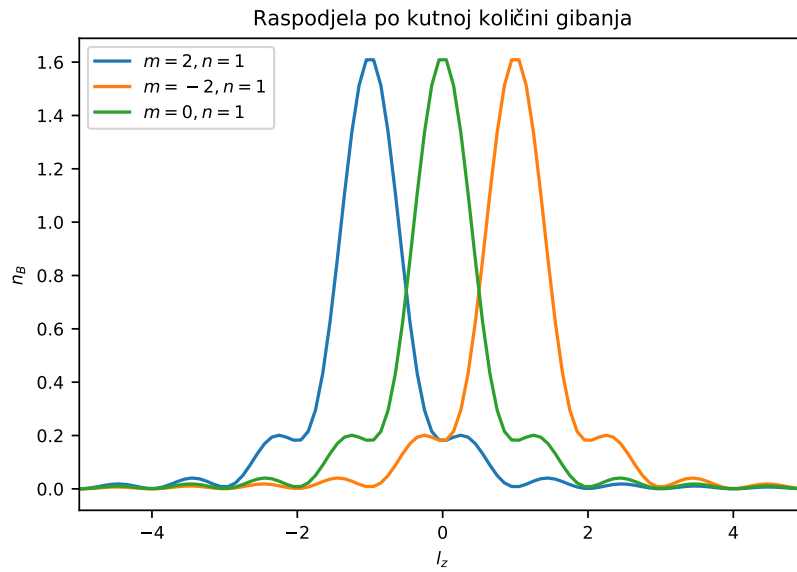
Raspodjela po kutnoj količini gibanja n_B u sustavu dva bozona je znatno drukčija od n_F jer za bozone u prostoru kutne količine gibanja ne vrijedi Paulijev princip isključenja. Tako za l_{max} koji odgovara maksimumu raspodjele imamo $n_B(l_{max}) > 1$. Za raspodjelu u koordinati kuta isključenje (amplituda 0 na istom mjestu) je posljedica odbojnog kontaktnog međudjelovanja. Raspodjela po kutnoj količini gibanja n_F u sustavu dva fermiona je i kvalitativno drukčija (uvijek manja ili jednaka 1) zato što



Slika 3.5: Faza jednočestične korelacijske funkcije u sustavu dva fermiona i dva bozona



Slika 3.6: Raspodjela po kutnoj količini gibanja u sustavu dva fermiona u stanju $m = 2$ i $n = 4$. Osnovne značajke raspodjele ovisne o kvantnom broju l su diskretnost i vrijednost 0 ili 1 za fermione.



Slika 3.7: Raspodjela po kutnoj količini gibanja u sustavu dva bozona s jakim odbojnim međudjelovanjem. Osnovne značajke kvantnog broja l su neprekidnost i za bozone karakterističan vrh.

za fermione vrijedi Paulijev princip isključenja i u l .

4 Elektron u magnetskom polju

Sistem elektrona naboja $-e$ i mase m_e u vremenski neovisnom magnetskom polju je opisan hamiltonijanom:

$$H = \frac{1}{2m_e}(\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\phi$$

Sada možemo napisati operator u koordinatnoj reprezentaciji:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_e}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e\vec{A}) \cdot (\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi + e\vec{A}\psi) &= (E + e\phi)\psi \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{2m_e}\vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\psi) - \frac{ie\hbar}{2m_e}\vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{2m_e}A^2\psi &= (E + e\phi)\psi \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{2m_e}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})\psi - \frac{ie\hbar}{m_e}\vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{2m_e}A^2\psi &= (E + e\phi)\psi \end{aligned}$$

U Coulombovom baždarenju $0 = \vec{\nabla} \cdot \vec{A}$ imamo konačno:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{m_e}\vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{2m_e}A^2\psi = (E + e\phi)\psi$$

Čestica naboja $-e$ koja je ograničena na jakom tankom prstenu radijusa ρ koji leži na $x - y$ ravnini. Zavojnica s radijusom $a \ll \rho$ se nalazi uzduž z-osi. Magnetsko polje B unutar zavojnice je usmjereno u pozitivnom smjeru z-osi. Vektorski potencijal je :

$$\mathbf{A} = \frac{-1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})$$

$$A_\rho = A_z = 0$$

$$A_\phi = \frac{1}{2}\rho B$$

U ovom sistemu hamiltonijan je:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi + \frac{ie\hbar}{2m_e}\vec{r} \times \vec{B} \cdot \vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{8m_e}(\vec{r} \times \vec{B})^2\psi = (E + e\phi)\psi$$

odnosno uz korištenje značajki trostrukog skalarno/vektorskog umnoška i operatora

kutne količine gibanja dobivamo:

$$(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i) \cdot \nabla = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r}_i \times \nabla) \quad (4.1)$$

$$(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i)^2 = B^2 r_i^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_i)^2 \quad (4.2)$$

$$\mathbf{L} = -i\hbar(\mathbf{r}_i \times \nabla) \quad (4.3)$$

slijedi

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + \frac{e}{2m_e} \vec{B} \cdot \vec{L} \psi + \frac{e^2}{8m_e} [r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] \psi = (E + e\phi) \psi.$$

a kako je u našem slučaju $\vec{r} \cdot \vec{B} = 0$ konačno dobivamo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + \frac{e}{2m_e} \vec{B} \cdot \vec{L} \psi + \frac{e^2}{8m_e} (r^2 B^2) \psi = (E + e\phi) \psi. \quad (4.4)$$

Diferencijalni operatori u cilindričnom koordinatnom sustavu imaju sljedeći oblik:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{\phi} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Uvrštavanjem ovih izraza u (4.4) dobivamo hamiltonijan:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{ie\hbar B}{2m_e} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e} + V(\rho)$$

ukoliko iskoristimo standardni izraz (2.9) za operator kutne količine gibanja dobijemo:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{L_z^2}{2m_e \rho^2} + \frac{eBL_z}{2m_e} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e} + V(\rho) = \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{2m_e \rho^2} \left(L_z + \frac{eB\rho^2}{2} \right)^2 + V(\rho) \end{aligned}$$

Sada definiramo $V(\rho)$ tako da je elektron ograničen na jakom tankom prstenu, tako da ρ možemo tretirati kao konstantu. Tada hamiltonijan postane:

$$H = \frac{1}{2m_e \rho^2} \left(L_z + \frac{e\Phi}{2\pi} \right)^2 \quad (4.5)$$

Uvrštavanjem (2.9) dobivamo:

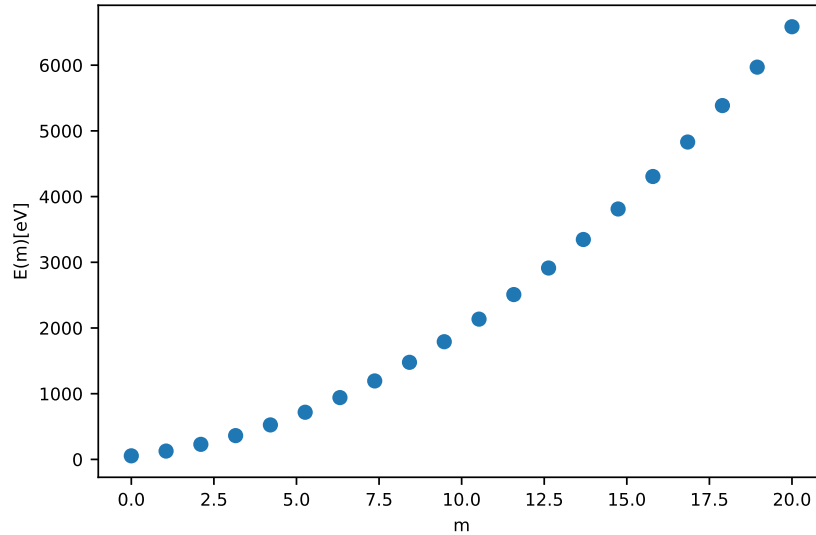
$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{-i\hbar}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e\Phi}{2\pi\rho} \right)^2$$

Svojtvene funkcije $\psi_m(\phi) = \frac{1}{2\pi\rho} e^{im\phi}$ od hamiltonijana (4.5) su svojtvene funkcije angularnog momenta (2.9).

$$L_z \psi = m\hbar \psi$$

gdje je $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Svojtvene vrijednosti za energiju (slika 4.1) su:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e \rho^2} \left(m + \frac{e\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2$$

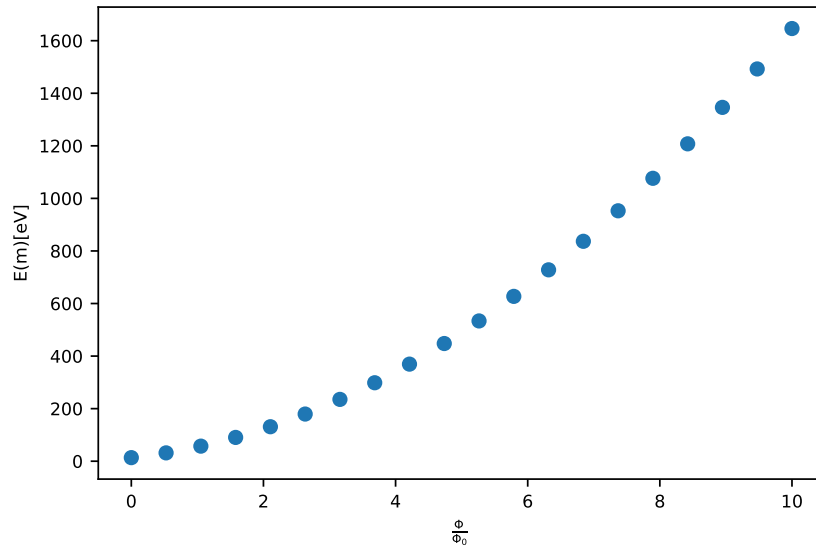


Slika 4.1: Svojtvene vrijednosti za energiju

4.1 Magnetsko polje i struje za elektrone na prstenu

Sada ćemo pogledati što se događa ako se uključi magnetsko polje. Odabiremo vektorski potencijal takav da je neprekidan na kritičnom polumjeru r_c , ali da je magnetsko polje konstantno unutar r_c i jednako nuli izvana:

$$\vec{A} = A_\varphi \cdot \vec{e}_\varphi + A_r \cdot \vec{e}_r + A_z \cdot \vec{e}_z$$



Slika 4.2: Svojtvene vrijednosti za energiju u ovisnosti o $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ gdje je $\Phi_0 = \frac{h}{e}$

$$A_r = 0, A_z = 0 \quad A_\varphi = \begin{cases} \frac{B \cdot r}{2}, & \text{ako } r \leq r_c \\ \frac{B \cdot r_c^2}{2r} = \frac{\Phi}{2\pi r}, & \text{ako } r > r_c \end{cases}.$$

ovaj izbor nam daje magnetsko polje u z smjeru (pri čemu se prsten nalazi u xy-ravnini):

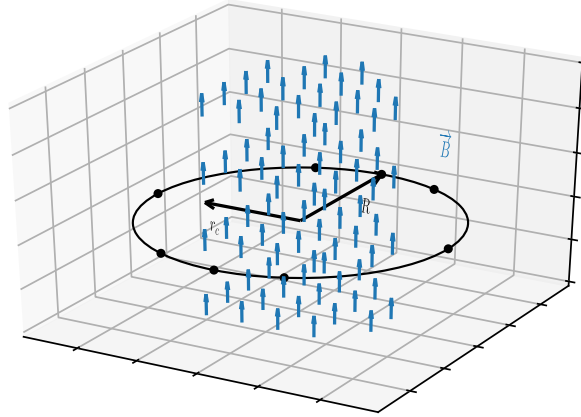
$$B_z = \begin{cases} B, & \text{ako } r \leq r_c \\ 0, & \text{ako } r > r_c \end{cases}.$$

pri čemu je $B_\varphi = B_r = 0$ (Slika 4.3).

U klasičnoj su slici elektroni u području bez polja, a to znači da na njih ne djeluje sila. Dakle, klasično se ne očekuje učinak na njihova stanja zbog promjene magnetskog polja. Međutim, kvantno mehanički opažanja su predviđena rješenjima Schrödingerove jednadžbe, koja sada uključuje magnetsko polje. Hamiltonijan s magnetskim poljem možemo zapisati kao

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{p} + e\hat{A})^2 = \frac{1}{2m_e} \left(-\frac{i\hbar}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e\Phi}{2\pi R} \right)^2.$$

Vlastite funkcije $\Psi_{m,s}$ i dalje su iste kao kod Hamiltonijana bez polja, ali su vlastite energije promijenjene:



Slika 4.3: Prsten s nekoliko elektrona

$$\Psi_m(\varphi) = N_m e^{im\varphi} \quad (4.6)$$

$$E(m, \Phi) = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \quad \Phi_0 = \frac{h}{e}$$

Očito je energija osnovnog stanja spektra periodična u toku magnetskog polja Φ s periodom kvantnog toka Φ_0 . Promjena toka za jedan kvant prisiljava elektron da, kako bi ostao u najnižem energetsom stanju, promijeni kutnu količinu gibanja (m za jedan). Ovaj rezultat je posljedica kutne količine gibanja i odgovarajućeg oblika energije EM polja.

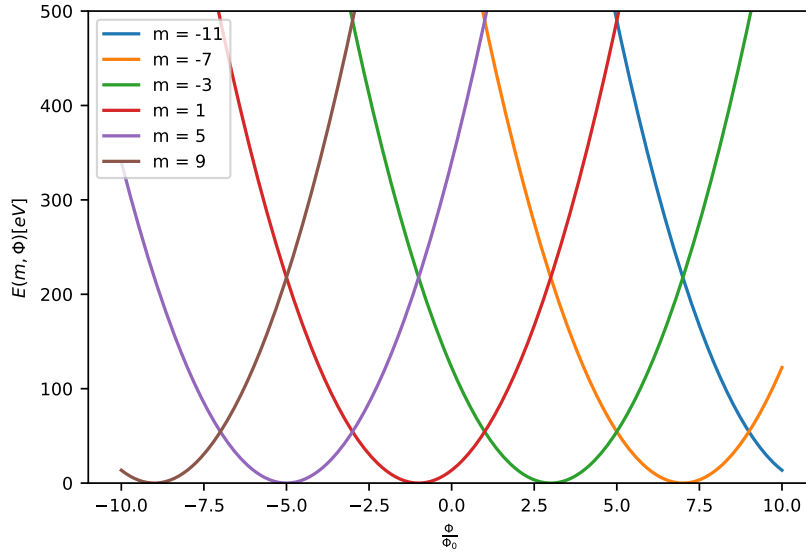
Prema slici 4.4 energija osnovnog stanja jednog elektrona na prstenu prožeta magnetskim poljem periodična je u toku Φ . Na isti način energija osnovnog stanja nekoliko nemeđudjelujućih elektrona također je periodična u toku jer svaki od elektrona ostaje u najnižem mogućem nezauzetom stanju.

$$E_G\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} \pm 1\right) = E_G\left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right) \quad (4.7)$$

Pogledajmo ponašanje struja na prstenu. Operator gustoće struje ima u kvantnoj mehanici sljedeći oblik:

$$\hat{j} = \frac{c}{e} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{A}}$$

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi R} \vec{e}_\varphi$$



Slika 4.4: Vlastite energije elektrona u ovisnosti o $\frac{\Phi}{\Phi_0}$

Brzina promjene energije ovisno o toku magnetskog polja je:

$$\begin{aligned}
 -c \frac{\partial E}{\partial \Phi} &= -c \langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \Phi} | \Psi \rangle = -c \langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{A}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial \Phi} | \Psi \rangle = \\
 &= \langle \Psi | \hat{j}_\varphi \frac{-e}{2\pi R} | \Psi \rangle = \frac{-e}{2\pi R} \int_0^{2\pi} d\varphi j(\varphi) = I
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

što nam ujedno daje i iznos struje I unutar prstena (Slika 4.5).

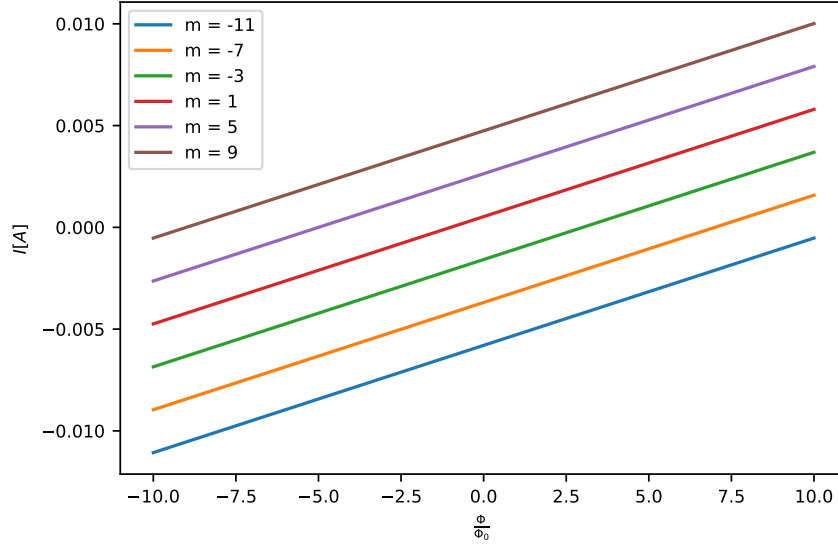
$$I = \frac{\hbar^2 e}{m_e R^2 \hbar} \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)$$

Kako vidimo iz jednadžbi (4.7) i (4.8) slijedi da je i kvantna struja periodična prema promjeni toka magnetskog polja. Rezultat koji je tipično kvantni i nema odgovarajuću varijantu s klasičnim strujama.

Dakle, ova je struja kvantno mehanička, a ne poput realnih klasičnih disipativna (poput električne struje u klasičnoj elektrodinamici) te je u savršeno izoliranom prstenu vječna jednom kada se pokrene.

4.2 Dva elektrona u magnetskom polju

Problem dva elektrona koji međusobno djeluju Coulombovim potencijalom u konstantnom magnetskom polju možemo riješiti transformacijom koordinata u slučaju centralnog potencijala. Hamiltonijan za dva elektrona u magnetskom polju je dan s:



Slika 4.5: Struja I unutar prstena u ovisnosti o $\frac{\Phi}{\Phi_0}$

$$H = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i))^2 + V(\mathbf{r}_{12})$$

Korištenjem $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_i}$ $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i)$ gdje je \mathbf{B} konstantno i okomito na ravninu $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ u kojoj se nalaze dva elektrona.

$$H = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2m_e} (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_i} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i))^2 + V(\mathbf{r}_{12}) \quad (4.9)$$

Gornji hamiltonijan za svaki elektron posebno odgovara (4.4) koji smo izveli na početku ovog odjeljka.

Podsjećamo da se elektroni gibaju u 2D ravnini okomitoj na smjer vektora magnetskog polja tako da vrijedi $\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_i = 0$. Procjena veličine magnetskog polja za atome pokazuje da i drugi član u sumi hamiltonijana (4.9) možemo zanemariti. Treći član je istovjetan 3D harmoničkom oscilatoru. Dobivamo konačno:

$$H = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2m_e} (-\hbar^2\nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \frac{1}{4}e^2(B^2r_i^2)) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

Ako pomnožimo gornji izraz s $\frac{m_e a_0^2}{\hbar^2}$ uz definiciju bezdimenzionalne konstante k (kons-

tanta fine strukture i Bohrovog polumjera su u zagradi)

$$k = \frac{e^2 B^2 a_0^4}{4\hbar^2} \quad \left(\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} \right) \quad (4.10)$$

$$\frac{m_e a_0^2}{\hbar^2} H \equiv H_b = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{1}{2} a_0^2 \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \frac{1}{2} k r_i^2 \right) + \frac{a_0}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (4.11)$$

(4.11) je bezdimenzionalni oblik međudjelujućeg Hamiltonijana za dva elektrona koja se nalaze u istom elastičnom potencijalu zadanom konstantnom opruge k . Prostorne koordinate su izražene u Bohrovim polumjerima a_0 . Analitička rješenja se mogu naći standardnom transformacijom u relativne koordinate $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ i $\mathbf{u} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$:

$$H_b = -\frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + \nabla_{\mathbf{r}_2}^2) + \frac{1}{2} k (r_1^2 + r_2^2) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

$$H_b = -\frac{1}{2} (2\nabla_{\mathbf{u}}^2 + \nabla_{\mathbf{R}}^2) + \frac{1}{2} k (R^2 + \frac{1}{2} u^2) + \frac{1}{|\mathbf{u}|}$$

$$H_b = -\frac{1}{4} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + k R^2 - \nabla_{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{4} k u^2 + \frac{1}{|\mathbf{u}|}$$

$$H_b = H_{\mathbf{R}} + H_{\mathbf{u}}$$

Gdje su:

$$H_{\mathbf{R}} = -\frac{1}{4} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + k R^2$$

$$H_{\mathbf{u}} = -\nabla_{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{4} k u^2 + \frac{1}{|\mathbf{u}|}$$

Valnu funkciju se može razdvojiti na umnožak trodimenzionalnog oscilatora u \mathbf{R} (mase 2 i konstante opruge $2k$) te jednostavne jednadžbe u relativnoj koordinati \mathbf{u} :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\frac{2\omega}{\pi} \right)^{3/4} \exp(-\omega R^2) \phi_0(\mathbf{u})$$

gdje je

$$\omega = \sqrt{k} = \frac{a_0}{2\alpha c} \omega_L$$

proporcionalno Larmorovoj frekvenciji $\omega_L \equiv \frac{eB}{m_e}$. Relativna valna funkcija $\phi_0(\mathbf{u})$ zadovoljava sljedeću jednadžbu:

$$(-\nabla_{\mathbf{u}}^2 + \frac{k}{4}u^2 + \frac{1}{u})\phi_0(\mathbf{u}) = \varepsilon\phi_0(\mathbf{u}) \quad (4.12)$$

pri čemu je ukupna energija $E = \frac{3\omega}{2} + \varepsilon$. Jednadžba (4.12) se može riješiti numerički, ali se može riješiti analitički za određene diskretne vrijednosti k . Da bismo dobili analitičko rješenje razvijemo $\phi_0(\mathbf{u})$ kao red potencija u u puta Gaussovo opadanje uslijed gibanja u potencijalu harmoničkog oscilatora:

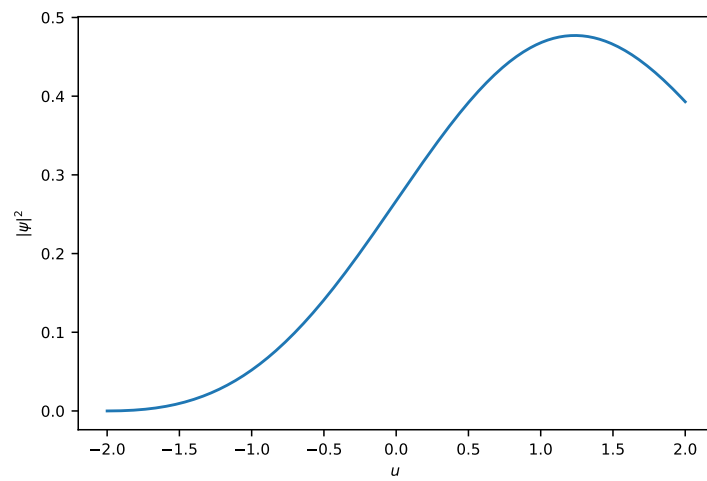
$$\phi_0(\mathbf{u}) = Y_{lm}(\Omega_u) \exp(-u^2/2u_0^2) \sum_{j=1}^N c_j u^j \quad (4.13)$$

gdje je $u_0 = \sqrt{2/\omega}$ skala duljine oscilatora bez Coulomb-ovog odbijanja, a Ω_u označava smjer \mathbf{u} . Umetanjem $\phi_0(\mathbf{u})$ oblika (4.13) u (4.12) daje dvostruki rekurzivni izraz za koeficijente c_j koji završava na konačnoj vrijednosti j samo za određene vrijednosti k . Za $l = 0$, prvih nekoliko vrijednosti su $k = \infty$ (granica neovisnih elektrona), $k = 1/4$ i $k = 1/100$, s energijama $\varepsilon/\Omega = 3/2, 5/4, 7/20$, za $N = 0, 1, 2$. Za ove vrijednosti k , valna funkcija se može zapisati analitički, npr. za $k = 1/4$.

$$\phi_0(\mathbf{u}) = \frac{(1 + u/2)\exp(-u^2/8)}{\sqrt{4\pi(5\sqrt{\pi} + 8)}} \quad (4.14)$$

Ovaj "Hooke-ov atom" korišten je za proučavanje Coulomb-ovog vrha osnovnog stanja dvoelektronske valne funkcije pri $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, "parova" Wigner-ova kristala u fizički čvrstog stanja, ali i kao test aproksimacija metode funkcionala gustoće ("DFT") za energiju osnovnog stanja elektronskih sistema te kao pedagoško sredstvo pri predstavljanju koncepta uvjetnih gustoća vjerojatnosti [6].

Slika 4.6 prikazuje gustoću vjerojatnosti od valne funkcije (4.14) u ovisnosti o iznosu vektora udaljenosti \vec{u} .



Slika 4.6: Gustoća vjerojatnosti dva elektrona koji međusobno djeluju Coulombovim potencijalom u homogenom magnetskom polju.

4.3 Dva elektrona na prstenu u magnetskom polju

Za dva elektrona ograničena na 1D kvantnom prstenu (QR) odredit ćemo rješenja i utjecaj dimenzije o energijama međudjelovanja i strukturi sistema. Rješenja za 1D kvantom prstenu s dva elektrona su zanimljiva ne samo s fizičke već i iz matematičke strane. Kako bismo istražili učinke dimenzije i međudjelovanja, točne energije nivoa i međudjelovanja ćemo odrediti korištenjem razvoja Coulomb-ova potencijala u red potencija pomoću kojeg je moguće odrediti egzaktno rješenje. Hamiltonijan za dva elektrona na 1D kvantnom prstenu uz tok magnetskog polja Φ' se može zapisati kao:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(-\frac{i\hbar}{R'_0} \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \frac{e\Phi'}{2\pi R'_0} \right)^2 + \frac{1}{2m_e} \left(-\frac{i\hbar}{R'_0} \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{e\Phi'}{2\pi R'_0} \right)^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon R'_0 \sqrt{2 - 2\cos(\phi_1 - \phi_2)}} \quad (4.15)$$

ako tok magnetskog polja izrazimo:

$$\Phi = -\frac{e\Phi'}{2\pi\hbar} = -\frac{\Phi'}{h/e} = -\frac{\Phi'}{\Phi'_0}$$

i pomnožimo jednadžbu (4.15) s faktorom:

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} a_0^2$$

dobivamo bezdimenzionalne izraze gdje je Bohrov polumjer definiran u (4.10).

Pri uređivanju izraza (4.15) smo iskoristili formulu polovičnog kuta:

$$\sqrt{2 - 2\cos(\phi_1 - \phi_2)} = 2|\sin[(\phi_1 - \phi_2)/2]|$$

dobivamo operator pogodan za analitičku i numeričku analizu:

$$\hat{H} = -\frac{1}{R_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi_1} + i\Phi \right)^2 - \frac{1}{R_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi_2} + i\Phi \right)^2 + \frac{\omega}{R_0 |\sin[(\phi_1 - \phi_2)/2]|} \quad (4.16)$$

gdje su:

$$R_0 = \frac{R'_0}{a_0}, \quad \omega = \frac{m_e e^2 a_0}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = 1$$

i gdje nam $\omega \neq 0$ predstavlja \hat{H} uz uključeno Coulomb-ovo međudjelovanje, a

R_0 nam je izražen u Bohr-ovim polumjerima a_0 . Hamiltonijan (4.16) je moguće separirati zamjenom varijabli u dio koji opisuje kvantno gibanje centra mase i dio koji odgovara relativnom gibanju $\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_r$ uz:

$$\hat{H}_c = -\frac{1}{2R_0^2} \left(\frac{d}{d\Theta} + 2i\Phi \right)^2 \quad (4.17)$$

$$\hat{H}_r = -\frac{1}{2R_0^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{\omega}{R_0 |\sin(\varphi/2)|} \quad (4.18)$$

Uz standardnu zamjenu varijabli $\Theta = (\phi_1 + \phi_2)/2$ i $\varphi = \phi_1 - \phi_2$. Ovakva separacija omogućava korištenje produktnog oblika višestručne valne funkcije.

$$\Psi(\phi_1, \phi_2) = \Xi(\Theta)\Upsilon(\varphi) \quad (4.19)$$

Uz periodičnost na kvantnom prstenu koju možemo izraziti na sljedeći način:

$$\Psi(\phi_1, \phi_2) = \Psi(\phi_1 + 2\pi, \phi_2) = \Psi(\phi_1, \phi_2 + 2\pi) = \Psi(\phi_1 + 2\pi, \phi_2 + 2\pi)$$

Iz prethodnih relacija slijedi da ukupna valna funkcija u novim varijablama zadovoljava:

$$\Xi_M(\Theta)\Upsilon_{m,s}(\varphi) = \Xi_M(\Theta + \pi)\Upsilon_{m,s}(\varphi \pm 2\pi) \quad (4.20)$$

Vlastite energije i funkcije za jednadžbu (4.17) su:

$$E_c(M) = \frac{(M + 2\Phi)^2}{2R_0^2}$$

$$\Xi_M(\Theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(iM\Theta) \text{ uz } M = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (4.21)$$

Za spin singletno ($s = 0$) i tripletno ($s = 1$) stanje vlastite energije jednadžbe (4.18) su za slučaj nemeđudjelujućih elektrona ($\omega = 0$):

$$E_r(m, s, \omega = 0) = \frac{m^2}{2R_0^2}$$

dok su valne funkcije jednadžbe (4.18):

$$\Upsilon_{m,s}(\varphi) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi(1+\delta_{m,0})}} \cos(m\varphi/2) & \text{za } s = 0, m = 0, 1, 2, 3, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin(m\varphi/2) & \text{za } s = 1, m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (4.22)$$

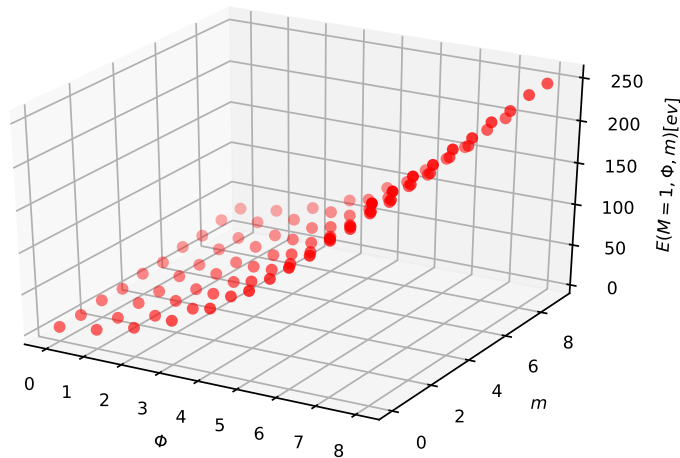
Iz (4.21), (4.22) i uvjeta (4.20) slijedi izraz $((-1)^{M+m} + (-1)^{M-m})/2 = 1$, pa zbroj $M+m$ mora biti paran. Sada možemo iskoristiti činjenicu da uz pomoć ovih funkcija i kvantnih brojeva možemo klasificirati višečestičnu valnu funkciju i u slučaju prisustva Coulomb-ova međudjelovanja za 1D kvantni prsten. Uključivanjem međudjelovanja mijenjaju se rješenja (4.22) u neke druge parne/neparne funkcije (u skladu s jednadžbom (4.18)). Vlastite energije E_0 operatora \hat{H} za slučaj ne međudjelujućih elektrona su:

$$E_0(M, m, s) = E_c(M) + E_r(m, s, \omega = 0) = \frac{(M + 2\Phi)^2 + m^2}{2R_0^2}$$

dok su vlastite energije E operatora \hat{H} za slučaj s međudjelovanjem $\omega \neq 0$ su:

$$E(M, m, s) = E_c(M) + E_r(m, s) = \frac{(M + 2\Phi)^2}{2R_0^2} + E_r(m, s)$$

gdje energije relativne dinamike E_r i odgovarajuće valne funkcije dobivamo rješavanjem jednadžbe (4.18). Slika 4.7 prikazuje vlastite energije E .

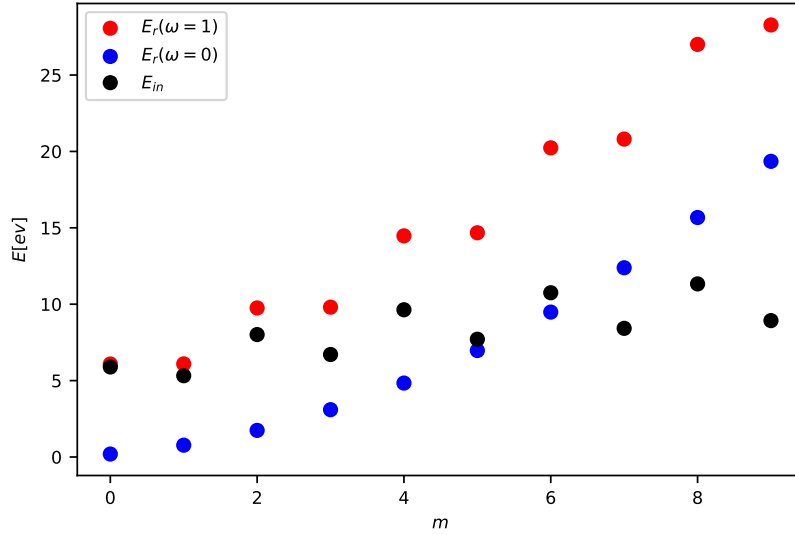


Slika 4.7: Vlastite energije E pri $M = 1$ u ovisnosti o m i Φ

Uvodimo energiju međudjelovanja E_{in} definiranu razlikom $E(M, m, s)$ i $E_0(M, m, s)$:

$$E_{in}(M, m, s) = E(M, m, s) - E_0(M, m, s) = E_r(m, s) - \frac{m^2}{2R_0^2}$$

koja ne ovisi o M . Slika 4.8 prikazuje energiju međudjelovanja E_{in} i vlastite energije E_r za jednadžbu (4.23) pri $\omega = 0$ i $\omega = 1$.

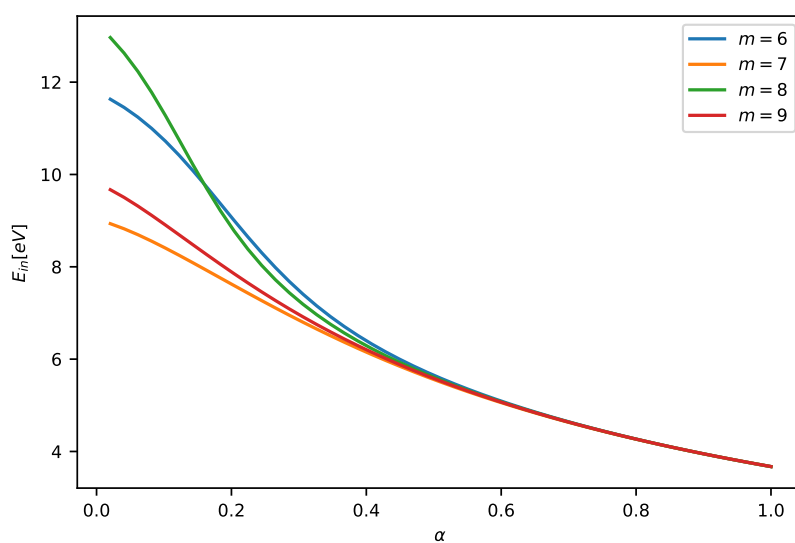


Slika 4.8: Vlastite energije za jednadžbu (4.23).

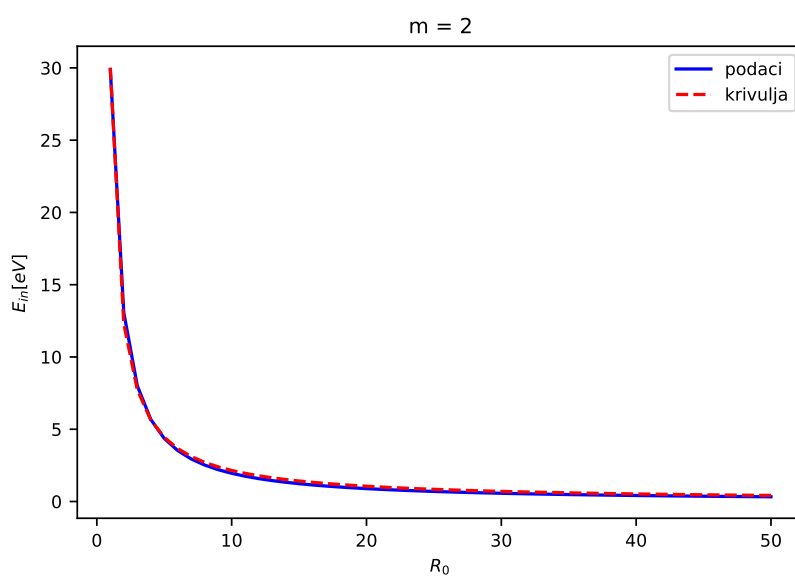
Slika 4.9 prikazuje energiju međudjelovanja E_{in} u ovisnosti o α . Slika 4.10 prikazuje energiju međudjelovanja E_{in} u ovisnosti o R_0 i prilagođavanje krivulji koja ima oblik $E_{in}(R_0) = \frac{1}{a*(R_0-1)+b}$, iz slike vidimo da ovisnosti ima hiperbolni oblik što R_0 bliže teži nuli to energija međudjelovanja E_{in} više teži beskonačnosti i obrnuto što R_0 teži beskonačnosti to energija međudjelovanja E_{in} teži nuli. Gdje su $a = 0.0480 \pm 7e - 04$ i $b = 0.0333 \pm 2e - 04$.

Za numeričku analizu pogodno je problem poopćiti tako da promatramo dva paralelna kvantna prstena udaljena za d čija središta leže na istom pravcu okomitom na ravnine u kojima leže prsteni (Slika 4.11).

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= R'_0 \cos \phi_1 \hat{x} + R'_0 \sin \phi_1 \hat{y} \\ \mathbf{r}_2 &= R'_0 \cos \phi_2 \hat{x} + R'_0 \sin \phi_2 \hat{y} + d \hat{z} \end{aligned}$$



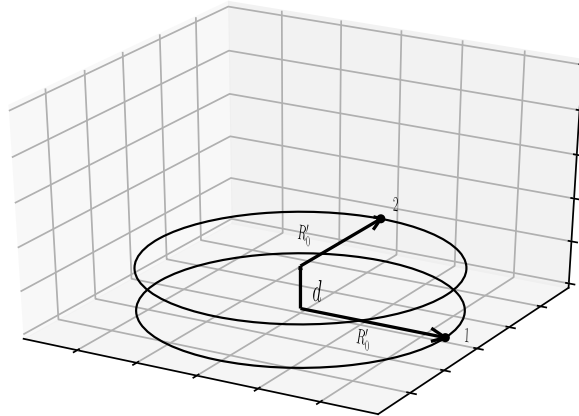
Slika 4.9: Energija međudjelovanja u ovisnosti o α



Slika 4.10: Energija međudjelovanja u ovisnosti o R_0

$$|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| = R'_0 \sqrt{2 - 2 \cos(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d^2}{R_0'^2}} = R'_0 \sqrt{4 \sin^2([\phi_1 - \phi_2]/2) + \frac{d^2}{R_0'^2}}$$

Uvođenjem bezdimenzionalnog parametra udaljenosti $\alpha = d/R_0$ dobivamo općenitije izraze u odnosu na (4.18) gdje se samo mijenja operator u relativnoj koordinati φ .



Slika 4.11: Dva paralelna kvantna prstena udaljena za d čija središta leže na istom pravcu okomitom na ravnine u kojima leže prstena

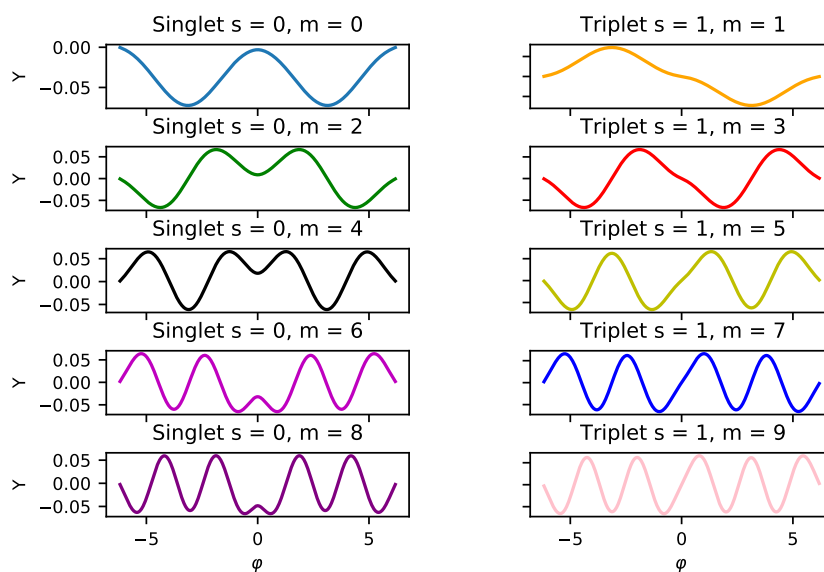
$$\hat{H}_r = -\frac{1}{2R_0^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{\omega}{R_0 \sqrt{\sin^2(\varphi/2) + \alpha^2}} \quad (4.23)$$

U granici $\alpha \rightarrow 0$ dobivamo nazad slučaj dva elektrona na istom prstenu iz jednadžbe (4.18). Iz matrice u jednadžbi (A.2) možemo naći vlastite energije i funkcije.

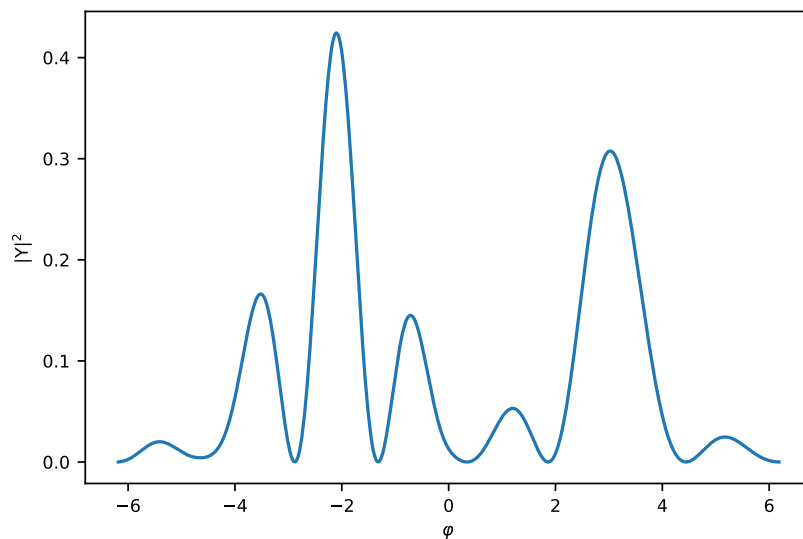
Slika 4.13 prikazuje gustoću vjerojatnosti $|\Upsilon(\varphi)|^2$ od normalizirane linearne kombinacije vlastitih funkcija iz slike 4.12 koje smo dobili iz hamiltonijana (4.23) pri $\omega = 1$. Normalizirana valna funkcija za koju smo izračunali gustoću vjerojatnosti ima oblik:

$$\Upsilon(\varphi) = A \sum_{m=0}^9 \Upsilon_m(\varphi)$$

gdje je A konstanta normalizacije.



Slika 4.12: Vlastite funkcije za jednadžbu (4.23) gdje je $\omega = 1$.



Slika 4.13: Gustoća vjerojatnosti od normalizirane linearne kombinacije vlastitih funkcija iz slike 4.12

4.4 Korelacijska funkcija za dva međudjelujuća elektrona

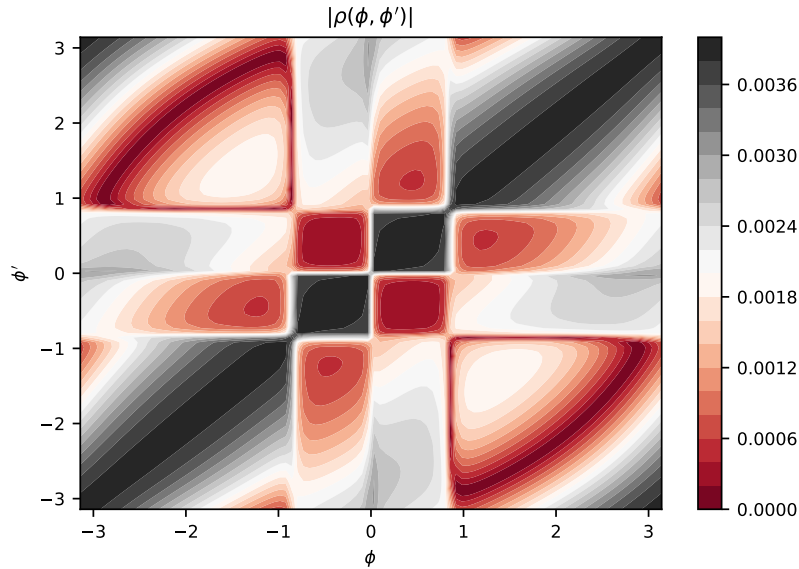
Prema jednadžbi (2.6) korelacijska funkcija za dvije čestice:

$$\rho(\phi'_1, \phi_1) = \int_0^{2\pi} d\phi_2 \Psi^*(\phi'_1, \phi_2) \Psi(\phi_1, \phi_2).$$

Uvrštavanjem valne funkcije iz (4.19) u (4.4) dobivamo korelacijsku funkciju za vlastite valne funkcije od sistema dva međudjelujuća elektrona na prstenu:

$$\begin{aligned} \rho(\phi'_1, \phi_1) &= \int_0^{2\pi} d\phi_2 \Xi^*\left(\frac{\phi'_1 + \phi_2}{2}\right) \Upsilon^*(\phi'_1 - \phi_2) \Xi\left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \Upsilon(\phi_1 - \phi_2) = \\ &= \frac{\exp(iM(\frac{\phi_1 - \phi'_1}{2}))}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_2 \Upsilon_m^*(\phi'_1 - \phi_2) \Upsilon_m(\phi_1 - \phi_2). \end{aligned} \quad (4.24)$$

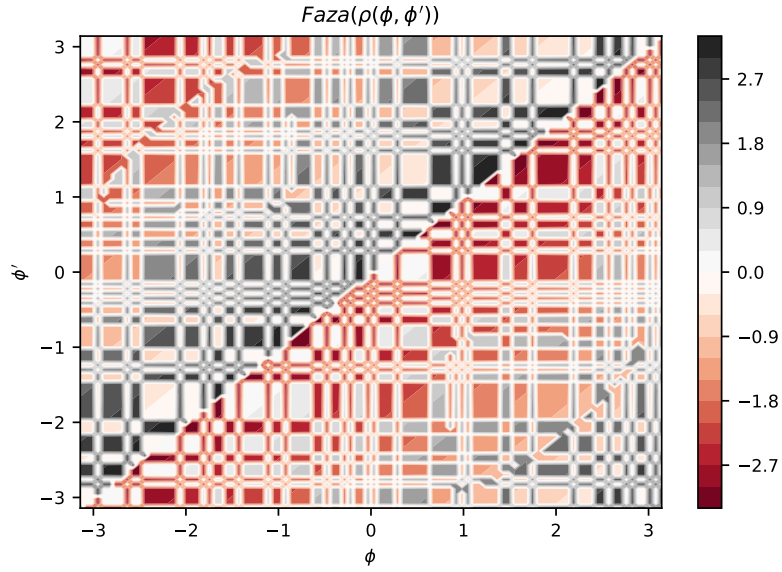
Jednodimenzionalni integral (4.24) se računa numerički iz rješenja hamiltonijana (4.23) gdje je $\omega = 1$. Slike 4.14, 4.15, 4.16 i 4.17 prikazuju korelacijske funkcije za vlastite valne funkcije od sistema dva međudjelujuća elektrona na prstenu.



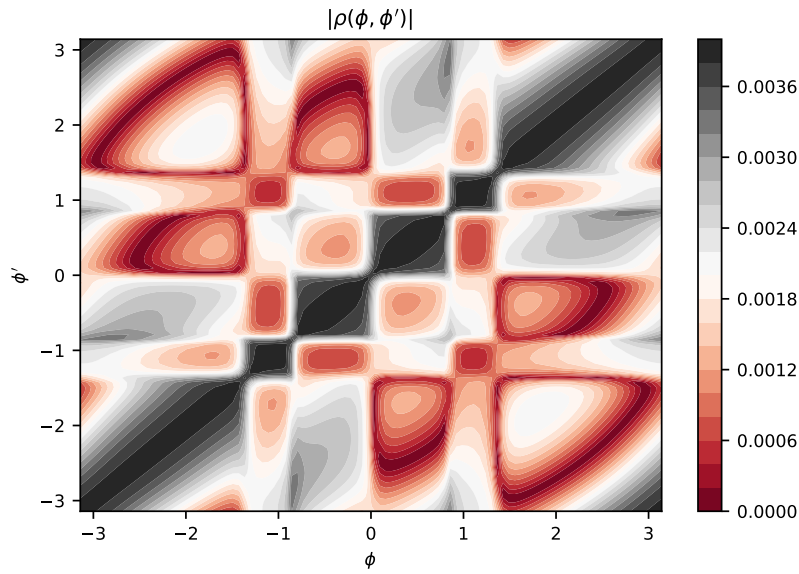
Slika 4.14: Apsolutna vrijednost korelacijske funkcije za vlastite valne funkcije gdje su $m = 1$ i $M = 1$

Za opću superpoziciju vlastitih stanja dobivamo sljedeću valnu funkciju:

$$\psi(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{M,m} c(M, m) \exp(iM \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}) \Upsilon_m(\phi_1 - \phi_2)$$



Slika 4.15: Faza korelacijske funkcije za vlastite valne funkcije gdje su $m = 1$ i $M = 1$

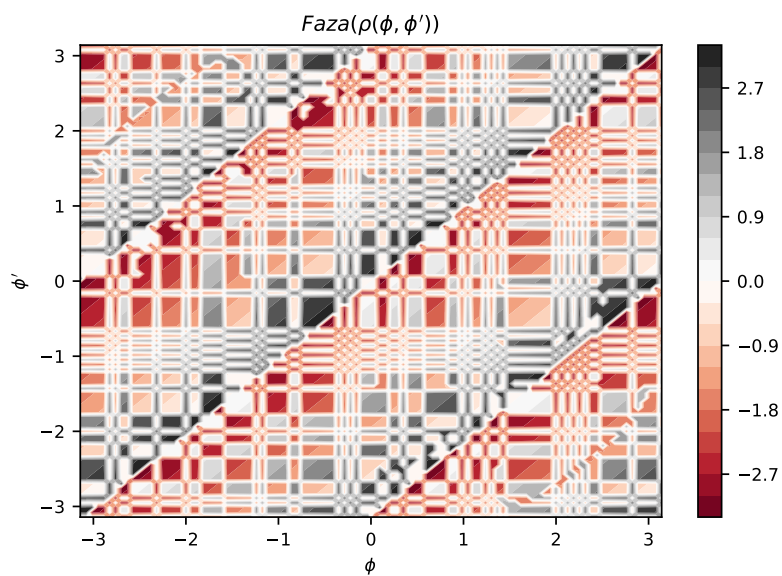


Slika 4.16: Apsolutna vrijednost korelacijske funkcije za vlastite valne funkcije gdje su $m = 2$ i $M = 2$

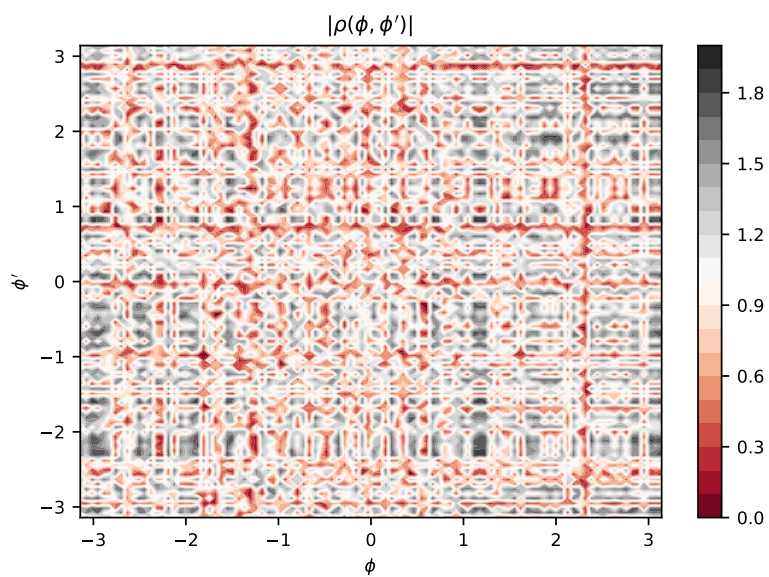
Za ovakvu valnu funkciju pri izračunu (4.4) se javlja izraz sljedećeg oblika:

$$\psi^*(\phi'_1, \phi_2) \psi(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{2\pi} \sum_{M', M} \exp(-i\frac{M'}{2}\phi'_1 + i\frac{M}{2}\phi_1 + i\frac{M - M'}{2}\phi_2) \sum_{m', m} c^*(M', m') c(M, m) \Upsilon_{m'}^*(\phi'_1 - \phi_2) \Upsilon_m(\phi_1 - \phi_2)$$

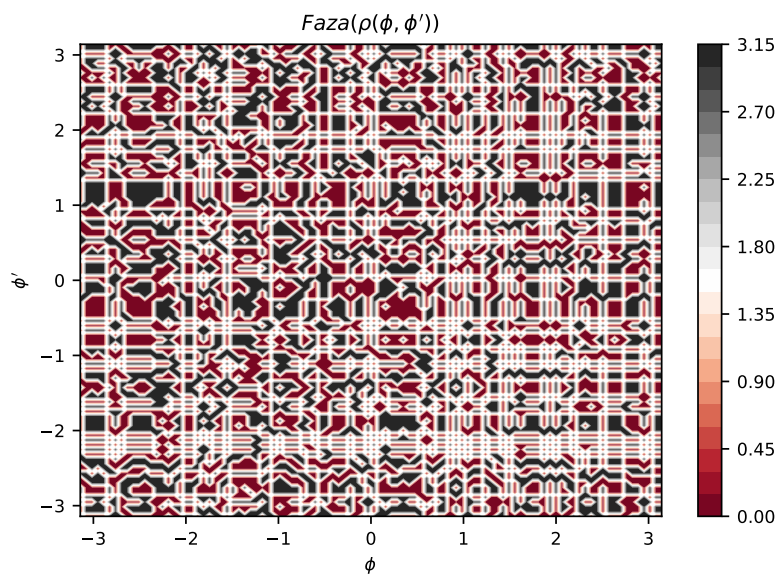
Slike 4.18 i 4.19 prikazuje korelacijsku funkciju za superpoziciju vlastitih stanja



Slika 4.17: Faza korelacijske funkcije za vlastite valne funkcije gdje su $m = 2$ i $M = 2$ od sistema dva međudjelujuća elektrona na prstenu.



Slika 4.18: Apsolutna vrijednost korelacijske funkcije za superpoziciju vlastitih stanja



Slika 4.19: Faza korelacijske funkcije za superpoziciju vlastitih stanja

4.5 Vremenska evolucija dva elektrona na prstenu u magnetskom polju

Vremensku evoluciju kvantnog sistema daje vremenski ovisna Schrödingerova jednačnja:

$$i\hbar \frac{\partial \Upsilon(\varphi, t)}{\partial t} = H\Upsilon(\varphi, t)$$

gdje je H hamiltonijan sustava, a \hbar reducirana Planckova konstanta. Rješenje ove parcijalne diferencijalne jednačnje daje valnu funkciju $\Upsilon(\varphi, t)$ za bilo koje kasnije vrijeme t , kad je poznat $\Upsilon(\varphi, 0)$. Rješenja za vremenski ovisnu Schrödingerovu jednačnju gdje je hamiltonijan $H = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$ takav da je potencijal $V(x, t)$ vremenski neovisan $V(x)$ su ona koja su produkt funkcije položaja i funkcije vremena:

$$\Upsilon(\varphi, t) = \Upsilon_m(\varphi) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}} \quad (4.25)$$

Jednačnja (4.25) opisuje evoluciju jednog stacionarnog stanja u vremenu. Međutim, iako stacionarna stanja evoluiraju u vremenu njihove mjerljive veličine (kao što je gustoća vjerojatnosti) su vremenski neovisane. Valna funkcija (4.25) je jedno rješenje vremenski ovisne Schrödingerove jednačnje, ali postoje i druga općenitija rješenja. Općenito rješenje vremenski ovisne Schrödingerove jednačnje će biti linearna kombinacija vremenski ovisnih stacionarnih stanja:

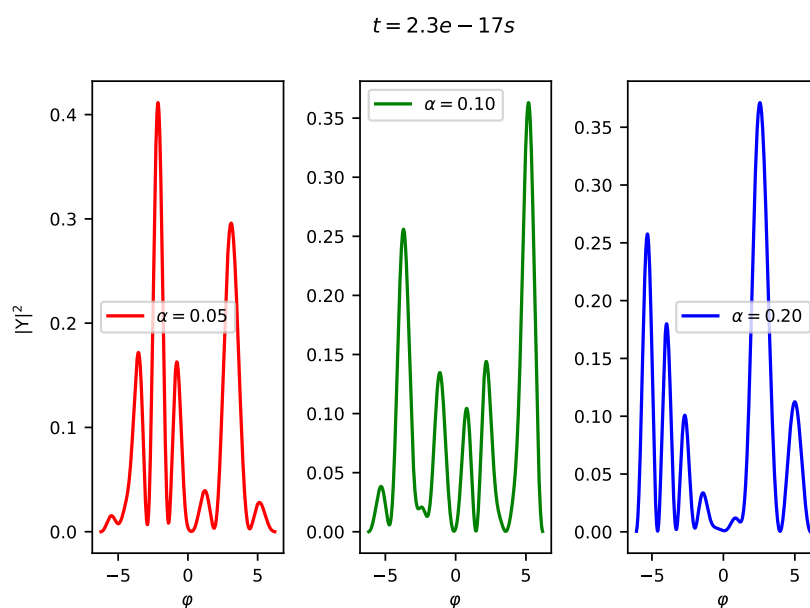
$$\Upsilon(\varphi, t) = \sum_m c_m \Upsilon_m(\varphi) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

Općenito rješenje čije su mjerljive veličine (kao što je gustoća vjerojatnosti) vremenski ovisne.

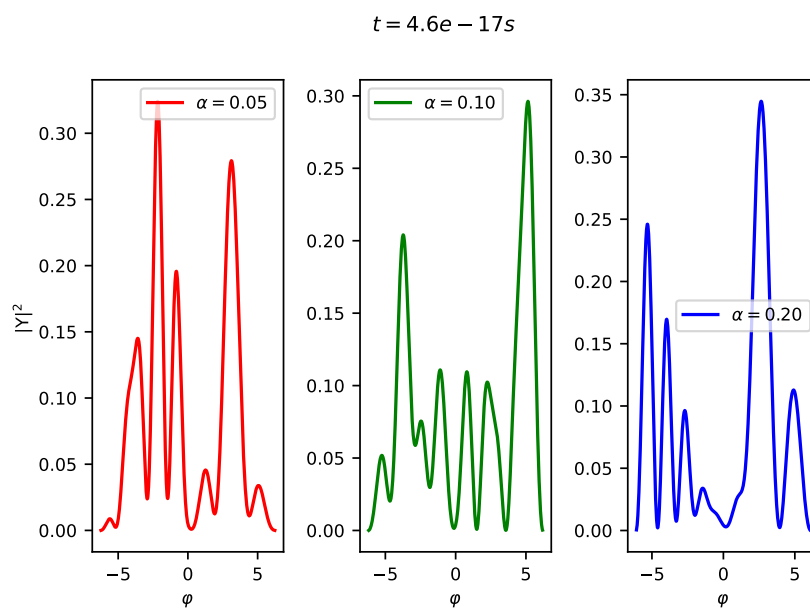
Slike 4.20, 4.21 i 4.22 prikazuju vremenski ovisne gustoće vjerojatnosti $|\Upsilon(\varphi, t)|^2$ koje su dobivene linearnom kombinacijom vremenski ovisnih stacionarnih stanja (slika 4.12) iz hamiltonijana (4.23) pri $\omega = 1$, za dva elektrona na prstenu u magnetskom polju. Normalizirane valne funkcije za koje smo izračunali gustoću vjerojatnosti imaju oblik:

$$\Upsilon(\varphi, t) = A \sum_{m=0}^9 \Upsilon_m(\varphi) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

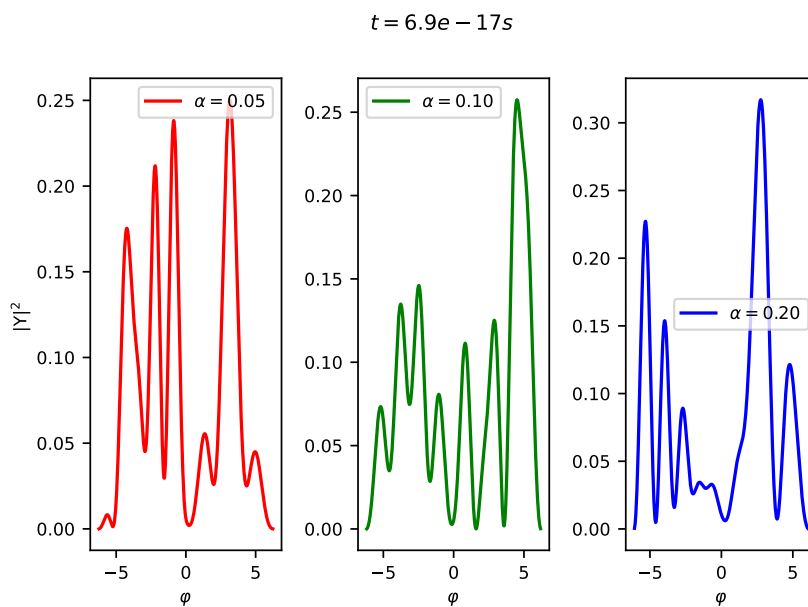
gdje je A konstanta normalizacije.



Slika 4.20: Vremenski ovisne gustoće vjerojatnosti



Slika 4.21: Vremenski ovisne gustoće vjerojatnosti



Slika 4.22: Vremenski ovisne gustoće vjerojatnosti

5 Zaključak

Teoretski opis kvantnih prstenova široko je područje koje uključuje različite vrste i snage međudjelovanja, kontinuirani i diskretni model, prisutnost ili odsutnost magnetskog polja, kvantne točke i ostale zanimljive realizacije. Namjera rada je pružanje jednostavnog teorijskog uvoda u kvantne prstenove koji opisuje neke višečestične značajke sistema, nekoliko međudjelujućih čestica i učinak magnetskog toka kroz prsten. Opis međudjelujućih kvantnih sistema je iznimno zahtjevan i težak problem teorijske fizike, a ovdje smo izdvojili neke sisteme dohvatljive formalizmom kvantne teorije obuhvaćena studijskim programom. Uvođenjem magnetskog polja u sistem kvantnih prstenova s nekoliko međudjelujućih čestica pokazali smo nekoliko važnih posljedica. Osnovna su velike razlike u energetske spektrima, jednočestičnim matricama gustoće i drugim fizičkim značajkama sustava koje smo predstavili. Posebno je podrobno opisan netrivialan višečestični problem dva elektrona na prstenu uz međudjelovanje Coulombovim potencijalom i stalno magnetsko polje.

6 Metodički dio

6.1 *Istraživački usmjerena nastav fizike*

Istraživački usmjerena nastava je nastava u kojoj pokušavamo razviti učeničko razumijevanje fizikalnih sadržaja, potaknuti učenje čiji je naglasak na razumijevanju i dubini, i želimo da učenici steknu osnove znanstvenog zaključivanja i razumijevanja (kako evaluirati znanost i njene rezultate) [7]. Istraživački usmjerenu nastavu ostvarujemo kroz kombiniranje već postojećeg znanja učenika, održavanje istraživačkog karaktera nastave i uz uključivanje učinkovitih nastavnih metoda. Neke od nastavnih metoda su konceptualna pitanja, razredna rasprava, interaktivno izvođenje pokusa, kooperativno rješavanje zadataka u grupama i računalne interaktivne metode. Konceptualna pitanja ispituju učeničko razumijevanje fizikalnih sadržaja, koncepata i njihova primjena. Razredna nastava je vođena putem razgovora nastavnika sa svim učenicima tijekom izvođenja pokusa ili odgovaranja na nastavnička pitanja u kojima nastavnik postavlja kvalitetna pitanja i povezuje učeničke odgovore. Nastavnik pri interaktivnom izvođenju pokusa uključuje učenike pri svakom koraku izvođenja pokusa i pri samom izvođenju zaključka iz pokusa, pokusi se mogu koristiti prilikom upoznavanju pojave, otvaranju problema ili pri rješavanju zadatka. Prilikom kooperativnog rješavanja zadataka u grupama uloga nastavnika je da opiše učenicima glavne korake u rješavanju fizikalnih problema i obilazi grupe kako bih im pomogao s potpitanjima, te da se prokomentiraju rješenja na kraju. Računalne interaktivne metode uglavnom koristimo kao zamjena interaktivnom izvođenju pokusa. Kod istraživački usmjerene nastave postoje dva osnovna tipa istraživanja, to su vođeno i otvoreno istraživanje. Otvoreno istraživanje pri kojem učenici samostalno postavljaju istraživačko pitanje i određuju način provjere tog pitanja, nije prikladno za redovnu nastavu. Vođeno istraživanje uključuje usmjereno vođenje od nastavnika i potiče samostalno zaključivanje učenika, glavno istraživanje za redovnu nastavu. Osnovna struktura istraživački usmjerene nastave se dijeli na tri dijela uvodni dio, središnji dio i završni dio. U uvodnom dijelu nastavnik daje učenicima motivaciju za određenu nastavnu jedinicu i demonstrira novu pojavu. Nastavnik to postiže pomoću pokusa i pitanjima kojima povezuje sadržaj sa svakodnevnim životom. Središnji dio je istraživački dio gdje učenici upoznaju sadržaj i znanstvene procese zaključivanja, te razvijaju razne vještine. Nastavnik započinje istraživanje s istraživačkim pitanjem,

istraživačko pitanje se odnosi na karakteristike koje nas zanimaju kod promatrane pojave, na istraživačko pitanje odgovaramo interaktivnim pokusom. Tijekom istraživanja učenici predlažu pokuse kojima ćemo testirati istraživačka pitanja, opisuju pokuse, daju predviđanja i analiziraju rezultate. U završnom dijelu učenici ponavljaju novi sadržaj, dok nastavniku ovaj dio omogućava provjeru postignutog stupanja znanja kod učenika. Nastavnik novi sadržaj može provjeriti pomoću jednostavnih primjera ili pokusa. Istraživački usmjerena nastava fizike se može smatrati uspješnom ako učenici tijekom nastave traže odgovore na pitanja, osmišljaju i opisuju pokuse, samostalno dolaze do zaključaka i svoje zaključke prezentiraju drugima [7].

6.2 Sila na vodič kojim teče struja u magnetskom polju

STUDENT: Luka Mikoč

RAZRED: 2. srednje

NASTAVNA JEDINICA: Sila na vodič kojim teče struja u magnetskom polju

PREDVIDENI BROJ SATI: 1

OBRAZOVNI ISHODI:

opisati Ampèreovu silu

opisati ovisnost Ampèreove sile o jakosti struje, o duljini vodiča, o jakosti magnetskog polja, o kutu između smjera struje i smjera silnica magnetskog polja

primijeniti pravilo desne ruke na različitim primjerima

razvijati komunikacijske vještine

razvijati logičko razmišljanje i znanstveno zaključivanje

ODGOJNI ISHODI:

razvijati sposobnost izražavanja vlastitog mišljenja

razvijati sposobnost slušanja i uvažavanja tuđeg mišljenja

razvijati sistematičnost i urednost

VRSTA NASTAVE: INTERAKTIVNA ISTRAŽIVAČKI USMJERENA NASTAVA

NASTAVNE METODE:

demonstracija pokusa

usmjerena rasprava

metoda pisanja i crtanja

OBLIK RADA: frontalni

NASTAVNA POMAGALA I SREDSTVA:

magneti, stalak, baterije i vodiči

LITERATURA:

Jakov Labor, Fizika 2, udžbenik za 2. razred gimnazije, Alfa, Zagreb, 2008.

Vladimir Paar, Anica Hrlec, Melita Sambolek, Karmena Vadlja Rešetar, Fizika oko nas 2, Školska knjiga, 2019.

TIJEK NASTAVNOG SATA

1. UVODNI DIO: otvaranje problema, prikupljanje ideja, upoznavanje pojave

DEMONSTRACIJSKI POKUS: demonstriramo pojavu pomicanja visećeg vodiča pomoću pokusa, pokus napravimo tako da objesimo na stalak vodič koji se nalazi u magnetskom polju našeg magneta, uključivanjem vodiča u strujni krug gledamo što se događa s vodičem.

Što opažate u ovom pokusu?

S učenicima komentiramo što su opazili i zašto se vodič pomaknuo. Učenici opisuju pokus. Tijekom pokusa vodič će se pomaknuti.

Zašto se vodič pomaknuo?

Zato što na vodič u magnetskom polju i kojim teče struja djeluje Ampèreova sila. Nakon što smo nazvali silu koja djeluje na vodič u magnetskom polju pišemo naslov Ampèreova sila.

2. SREDIŠNJI DIO: konstrukcija modela - fizikalni i matematički opis pojave

ISTRAŽIVAČKO PITANJE: O čemu ovisi Ampèreova sila?

ISTRAŽIVAČKI POKUS: izvodimo pokus tako da objesimo vodič na stalak i pomoću magneta vodič stavimo u magnetsko polje. Kada kroz vodič pustimo struju vodič će se pomaknuti.

Prikupljamo učeničke prijedloge. Tijekom izvođenja pokusa učenici opisuju pokus.

Što će se dogoditi kada promijenimo jakost magnetskog polja, duljine vodiča i jakosti struje?

Povećanjem jakosti magnetskog polja, duljine vodiča i jakosti struje na vodič će djelovati jača Ampèreova sila, zato što je Ampèreova sila proporcionalna s duljinom vodiča, jakosti struje i magnetskim poljem.

Što će se dogoditi kada mijenjamo kut između silnica magnetskog polja i smjera struje koja teče kroz vodič?

Kod mijenjanja kuta između silnica magnetskog polja i smjera struje vidimo da se mijenja iznos Ampèreove sile, gdje je iznos najveći kada su silnice magnetskog polja okomite na smjer struje i djelovanje sile nestaje kada su silnice magnetskog polja paralelne sa smjerom struje.

Nakon određivanja ovisnosti fizikalnih veličina o kojima ovisi Ampèreova sila zapisujemo iznos Ampèreove sile $F_A = BIl \sin \varphi$.

ISTRAŽIVAČKO PITANJE: Određivanje smjera djelovanja Ampèreove sile?

Zajedno s učenicima promatramo u kojem smjeru se vodič pomaknuo. Pokušavamo odrediti u kojem smjeru djeluje Ampèreova sila u različitim postavkama pokusa. Opisujemo pravilo desne ruke za određivanje smjera Ampèreove sile. Ispruženi prsti desne ruke pokazuju smjer struje, a silnice magnetskog polja imaju smjer iz dlana, palac pokazuje smjer djelovanja Ampèreove sile.

3. ZAVRŠNI DIO: primjena modela - korištenje novostečenog znanja u novim situacijama, provjera ostvarenosti obrazovnih ishoda

Konceptualna pitanja

Koliki iznos ima Ampèreova sila ako je kut između silnica magnetskog polja i smjera struje 0° ?

A) $F_A = 0$

B) $F_A > 0$

C) $F_A < 0$

Rj. A)

Koji je kut između silnica magnetskog polja i smjera struje ako je iznos Ampèreove sile najveći?

A) 45°

B) 0°

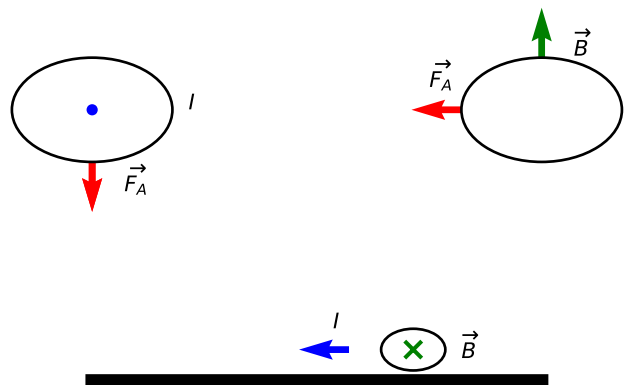
C) 90°

Rj. C)

Kakva je ovisnost Ampèreove sile o jakosti struje?

- A) Linearna
 - B) Proporcionalna
 - C) obrnuto proporcionalna
- Rj. B)

U sljedećim primjerima (Slika 6.1) odredite pomoću pravila desne ruke smjerove nedostajućih fizikalnih veličina.



Slika 6.1: Nekolika primjera na kojima koristimo pravilo desne ruke

PLAN PLOČE

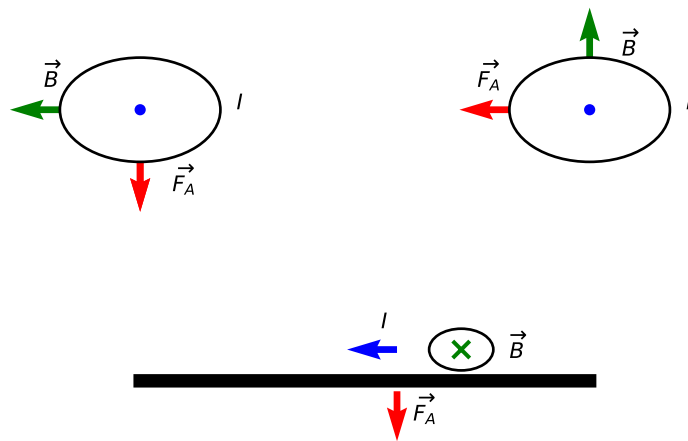
Sila na vodič kojim teče struja u magnetskom polju

Ampèreova sila

O čemu ovisi Ampèreova sila?

Određivanje smjera djelovanja Ampèreove sile?

$$F_A = BIl \sin \varphi$$



Slika 6.2: Rješenja primjera

Dodaci

Dodatak A Matrica konačnih razlika

Za numeričku analizu jednadžbe (4.23) koristimo centralnu diferenciju prvog i drugog reda:

$$\frac{d\Upsilon}{d\varphi} = \frac{\Upsilon_{i+1} - \Upsilon_{i-1}}{2\Delta\varphi}$$

$$\frac{d^2\Upsilon}{d\varphi^2} = \frac{\Upsilon_{i+1} - 2\Upsilon_i + \Upsilon_{i-1}}{\Delta\varphi^2} \quad (\text{A.1})$$

Uvrštavanjem centralne diferencije drugog reda (A.1) u jednadžbu (4.23) dobivamo jednadžbu kojom možemo stvoriti matricu hamiltonijana:

$$\hat{H}_r \Upsilon = -\frac{2}{R_0^2} \frac{\Upsilon_{i+1} - 2\Upsilon_i + \Upsilon_{i-1}}{\Delta\varphi^2} + \frac{\omega\Upsilon_i}{R_0\sqrt{\sin^2(\varphi_i/2) + \alpha^2}}$$

$$\hat{H}_r \Upsilon = \frac{-2}{(R_0\Delta\varphi)^2} \Upsilon_{i+1} - \frac{-2}{(R_0\Delta\varphi)^2} \Upsilon_{i-1} + \left(\frac{4}{(R_0\Delta\varphi)^2} + \frac{\omega}{R_0\sqrt{\sin^2(\varphi_i/2) + \alpha^2}} \right) \Upsilon_i$$

$$\begin{bmatrix} \frac{4}{(\Delta\varphi R_0)^2} + \frac{\omega}{R_0\sqrt{\sin^2(\varphi_1/2) + \alpha^2}} & \frac{-2}{(\Delta\varphi R_0)^2} & \cdots & & 0 \\ \frac{-2}{(\Delta\varphi R_0)^2} & & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & \frac{-2}{(\Delta\varphi R_0)^2} & \frac{4}{(\Delta\varphi R_0)^2} + \frac{\omega}{R_0\sqrt{\sin^2(\varphi_N/2) + \alpha^2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Upsilon_1 \\ \Upsilon_2 \\ \Upsilon_3 \\ \vdots \\ \Upsilon_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Upsilon_1 \\ \Upsilon_2 \\ \Upsilon_3 \\ \vdots \\ \Upsilon_N \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Dodatak B Programska podrška

U ovom diplomskom radu koristimo programski jezik Python. Python je programski jezik opće namjene, interpretiran i visoke razine. Python dopušta programerima korištenje nekoliko stilova programiranja objektno orijentirano, strukturalno i funkcionalno programiranje. Python ima automatsku memorijsku alokaciju. Python teži jednostavnijoj i manje pretrpanoj sintaksi, ali jezik sadrži napredne mogućnosti za programere. Python je dizajniran da bude vrlo proširiv s raznim programskim paketima. Jedan od takvih paketa je Numpy. NumPy je temeljni paket za znanstveno programiranje i uporabu numeričkih metoda u Pythonu. To je Python-ov paket koji omogućava rad sa strukturom višedimenzionalnih polja, razne izvedene objekte i izbor rutina za brze operacije na poljima, uključujući matematičke, logičke, manipulacije oblicima, sortiranje, odabir, osnovna linearna algebra i još mnogo toga. Glavni dio NumPy paketa je objekt ndarray, koji sadrži n-dimenzionalna polja istih tipova podataka. NumPy polja imaju fiksnu veličinu pri stvaranju, za razliku od Python lista koje mogu dinamički rasti. Promjenom veličine ndarray polja stvorit će se novo polje i izbrisati izvorno. Svi elementi u NumPy polju moraju biti istog tipa. NumPy polja omogućavaju korištenje napredne matematičke i druge vrste operacija na velikom broju podataka. Takve se operacije obično izvode učinkovitije i s manje koda. Drugi paket koji koristimo je SciPy. Paket SciPy koristi NumPy polja i sadrži veliki broj rutina korisnih za fiziku, matematiku, druga znanstvena i tehnička područja. SciPy sadrži module za optimizaciju, linearnu algebru, integraciju, interpolaciju, posebne funkcije, ODE rješavače i druge rutine uobičajene u znanosti i inženjerstvu. Postoje numeričke metode koje sadrže NumPy i SciPy. U takvim slučajevima rutine iz SciPy imaju više mogućnosti. Zadnji paket za Python koji koristimo je Matplotlib. Matplotlib je paket za crtanje grafova za programski jezik Python i njegovo numeričko matematičko proširenje NumPy. Pruža objektno orijentirani API za ugrađivanje grafova u aplikacije pomoću GUI-a opće namjene kao Tkinter, wxPython, Qt ili GTK+. SciPy koristi Matplotlib. Za numeričko rješenje parcijalne diferencijalne jednadžbe (4.23) drugog reda koristimo funkciju $\text{PDE1d2eCMf}(x_1, x_2, N, R_0, \alpha, \omega)$, gdje x_1 i x_2 definiraju interval domene unutar koje tražimo naše rješenje. N je broj točaka u definiranoj domeni i broj točaka u rješenju. Dok su R_0 , α i ω parametri iz naše parcijalne diferencijalne jednadžbe.

Listing 1: Funkcija PDE1d2eCMf

```
import numpy as np
from scipy.sparse import diags
from scipy.sparse.linalg import eigsh

def PDE1d2eCMf(x1, x2, N, R0, alpha, omega):
    x = np.linspace(x1 + alpha, x2 - alpha, N)
    dx = x[1] - x[0]

    T = -2.*diags([-2., 1., 1.], [0,-1, 1], shape=(N, N))/(dx*R0)**2
    U_vec = omega/(R0*np.sqrt(np.sin(x/2.)**2 + alpha**2 ))
    U = diags([U_vec], [0])
    H = T + U

    vals, vecs = eigsh(H, k = 10, which = 'SM')
    return vals, vecs
```

Funkcija `PDE1d2eCMf` stvara pomoću funkcije `diags` iz paketa `scipy.sparse` matricu H iz jednadžbe (A.2). Domena našeg rješenja i samo rješenje je prikazano s N točaka koje su u kodu predstavljeni kao vektori od N elemenata pomoću paketa `numpy`. Funkcija `eigsh` iz paketa `scipy.sparse.linalg` određuje vlastite vektore i vlastite vrijednosti od matrice H , pošto je matrica H numerički oblik hamiltonijana (4.23) funkcija `eigsh` u našem primjeru određuje vlastite energije i vlastite valne funkcije koje imaju vektorski oblik, prikazanih u Python-u pomoću NumPy polja.

Prilikom računanja gustoće vjerojatnosti valne funkcije koja je dobivena linearnom kombinacijom vlastitih funkcija tu valnu funkciju smo prvo normalizirali pomoću funkcije `normalization(vec, u)`. Gdje je `vec` vektorski oblik naše valne funkcije, a `u` je domena po kojoj normaliziramo valnu funkciju.

Funkcija normalization

```
from scipy.integrate import simps

def normalization(vec, u):
    pd = np.multiply(np.conj(vec), vec)
    I = simps(pd, u)
    nor_vec = (1./np.sqrt(I)) * vec
    return nor_vec
```

U funkciji `normalization` množimo konjugiranu i običnu valnu funkciju, te od tog umnoška `pd` određujemo numerički integral I po domeni `u` pomoću funkcije za numeričko integriranje `simps` iz paketa `scipy.integrate`. Dobiveni realni broj množimo s našom valnom funkcijom i dobivamo normaliziranu valnu funkciju `nor_vec`.

Funkciju `simps` koristimo još kod numeričkog integriranja za dobivanje korelacijskih funkcija od dva ili više čestica (2.6).

Rješenja u ovom diplomskom radu prikazujemo pomoću grafova i paket koji koristimo za crtanje tih grafova je `matplotlib.pyplot`.

Slike 2.3, 2.5, 3.3 i 3.4 dobivamo tako što analitička rješenja crtamo pomoću Python-a.

Crtanje analitičkih rješenja

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import corrfp

phi1 = np.linspace(0, 2*np.pi, 200)
phi1_ = np.linspace(0, 2*np.pi, 200)

phi1, phi1_ = np.meshgrid(phi1, phi1_)
dphi = phi1 - phi1_
F1 = corrfp.rho1spN(m1, dphi)
F1_a = np.absolute(F1)

fig, ax = plt.subplots()
im = ax.contourf(phi1, phi1_, F1_a, 20, cmap='RdGy')
ax.set_xlabel(r"$\phi$")
ax.set_ylabel(r"$\phi'$")
ax.set_title(r"$|\rho(\phi, \phi')|$")
fig.colorbar(im, ax=ax)
plt.show()
```

Crtanje analitičkih rješenja s dvije varijable u Python-u radimo tako što prvo odredimo domenu naših varijabli, te domene su određene u `phi1` i `phi1_`. Varijable `phi1` i `phi1_` su vektori koji su prikazani pomoću strukture NumPy polje. `phi1` i `phi1_` su matrice prikazane pomoću strukture NumPy polje koje se sastoje od varijabla `phi1` i `phi1_`. Matrice `phi1` i `phi1_` su prikazane u tablicama B.2 i B.1. Funkcija `cor-`

`rfp.rho1spN` je funkcija našeg analitičkog rješenja. Gdje je $F1$ matrica prikazana pomoću strukture NumPy polja koja u sebi sadrži rješenja od varijabla ϕ_1 i $\phi_1_$ (Tablica B.3). Funkcija `ax.contourf` je funkcija iz `matplotlib.pyplot` paketa koja crta ispunjene konture i koja prima naše tri matrice kao unos ϕ_1 , $\phi_1_$ i $F1$. Slike 4.14, 4.16 i 4.18 dobivamo crtanjem numeričkih rješenja u Python-u.

Crtanje numeričkih rješenja

```
import numpy as np
from scipy.integrate import simps
import matplotlib.pyplot as plt
import PDE1d2electronsCM

phi1_ = np.linspace(0 , L, n1_)
phi1 = np.linspace(0 , L, n1)

x = np.linspace(0 + alpha, L - alpha, N)
X, Y = np.meshgrid(phi1, phi1_)
li = [(1, 1, 1), (2, 2, 2)]
n_l = len(li)
for k in range(n_l):
    m_ = li[k][0]
    m = li[k][1]
    M = li[k][2]
    F = np.zeros((n1_, n1))
    for i in range(n1_):
        for j in range(n1):
            vec_conj = np.conj(vf1_n[i][:, m_])
            vec = vf1n[j][:, m]
            vecsm = np.multiply(vec_conj, vec)
            I = simps(vecsm, x)
            F[i][j] = I

E = PDE1d2electronsCM.func(X, Y, M)
R = np.multiply(E, F)
R1 = np.absolute(R)
plt.figure(k + 1)
fig, ax = plt.subplots()
im = ax.contourf(X, Y, R1, 20, cmap='RdGy')
ax.set_xlabel(r"$\phi_1$")
```

```

ax.set_ylabel(r"$\phi'$")
ax.set_title(r"$|\rho(\phi, \phi')|$")
fig.colorbar(im, ax=ax)
plt.show()

```

Crtanje numeričkih rješenja s dvije varijable u Python-u postizemo tako da prvo odredimo domenu naših varijabli ϕ_1 i $\phi_{1_}$. Varijable ϕ_1 i $\phi_{1_}$ su vektori koji su prikazani pomoću strukture NumPy polje. Matrice X i Y su matrice prikazane pomoću strukture NumPy polje koje se sastoje od varijabla ϕ_1 i $\phi_{1_}$, te su prikazane u tablicama B.2 i B.1. Matrica R sadrži naše numeričko rješenje, prikazano u tablici B.3. Matricu R dobivamo tako što za svaki element vektora ϕ_1 i $\phi_{1_}$ numerički određujemo vlastite funkcije od jednadžbe (4.23) pomoću funkcije `PDE1d2electronsCM.PDE1d2eCMf` iz isječka koda 1, te nakon dobivene vlastite funkcije koje se nalaze u varijabli `vf1n` množimo s konjugiranim oblikom vlastite funkcije iz `vf1n_` određene parametrom `m i m_`. Funkcija `ax.contourf` je funkcija iz `matplotlib.pyplot` paketa koja crta ispunjene konture i koja prima naše tri matrice kao unos X, Y i R .

	0	1	2	...	j	...	N
0	ϕ'_0	ϕ'_0	ϕ'_0	...	ϕ'_0	...	ϕ'_0
1	ϕ'_1	ϕ'_1	ϕ'_1	...	ϕ'_1	...	ϕ'_1
2	ϕ'_2	ϕ'_2	ϕ'_2	...	ϕ'_2	...	ϕ'_2
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	...	\vdots
i	ϕ'_i	ϕ'_i	ϕ'_i	...	ϕ'_i	...	ϕ'_i
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
N	ϕ'_N	ϕ'_N	ϕ'_N	...	ϕ'_N	...	ϕ'_N

Tablica B.1: Matrica ϕ' .

	0	1	2	...	j	...	N
0	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N
1	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N
2	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	...	\vdots
i	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
N	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N

Tablica B.2: Matrica ϕ .

	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	...	ϕ_j	...	ϕ_N
ϕ'_0	$\rho(\phi_0, \phi'_0)$	$\rho(\phi_1, \phi'_0)$	$\rho(\phi_2, \phi'_0)$...	$\rho(\phi_j, \phi'_0)$...	$\rho(\phi_N, \phi'_0)$
ϕ'_1	$\rho(\phi_0, \phi'_1)$	$\rho(\phi_1, \phi'_1)$	$\rho(\phi_2, \phi'_1)$...	$\rho(\phi_j, \phi'_1)$...	$\rho(\phi_N, \phi'_1)$
ϕ'_2	$\rho(\phi_0, \phi'_2)$	$\rho(\phi_1, \phi'_2)$	$\rho(\phi_2, \phi'_2)$...	$\rho(\phi_j, \phi'_2)$...	$\rho(\phi_N, \phi'_2)$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	...	\vdots
ϕ'_i	$\rho(\phi_0, \phi'_i)$	$\rho(\phi_1, \phi'_i)$	$\rho(\phi_2, \phi'_i)$...	$\rho(\phi_j, \phi'_i)$...	$\rho(\phi_N, \phi'_i)$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
ϕ'_N	$\rho(\phi_0, \phi'_N)$	$\rho(\phi_1, \phi'_N)$	$\rho(\phi_2, \phi'_N)$...	$\rho(\phi_j, \phi'_N)$...	$\rho(\phi_N, \phi'_N)$

Tablica B.3: Matrica $\rho(\phi, \phi')$.

Slika 4.10 dobivamo prilagođavanjem krivulje u Python-u.

Prilagođavanje krivulji

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import PDE1d2electronsCM
from scipy.optimize import curve_fit

def model(x, a, b):
    return 1./(a * (x - 1) + (b - 0))

for i in range(0, n):
    vals, vecs = PDE1d2electronsCM.PDE1d2eCMf(-L, L, N, R0[i], alpha, omega_1)
    vals0, vecs0 = PDE1d2electronsCM.PDE1d2eCMf(-L, L, N, R0[i], alpha, omega_0)
    ene.append(vals)
    ene_0.append(vals0)

e=np.asarray(ene)
enea = (np.asarray(ene)).T
ene_0a = (np.asarray(ene_0)).T
ene_ina = enea - ene_0a

fit, cov = curve_fit(model, R0, ene_ina[2])
corr = np.ones(np.shape(cov))

n, m = np.shape(corr)

p = np.sqrt(np.diag(cov))

l = []
for i in range(n):
    l.append(fit[i])
    l.append(p[i])

for i in range(n):
    for j in range(m):
        corr[i][j] = cov [i][j] / np.sqrt(cov[i][i] * cov[j][j])

plt.figure(1)
fig, axs = plt.subplots()
```

```

axs.plot(R0, ene_ina[2], "b-", label = "podaci")
axs.plot(R0, model(R0, *fit), "r--", label = "krivulja")
axs.set_ylabel(r"$E_{in}[eV]$")
axs.set_xlabel(r"$R_0$")
axs.set_title(r'm = 2')
plt.legend()
plt.show()

```

Kod prilagođavanja krivulje prvo određujemo podatke koje želimo prilagoditi krivulji koja je prikazana u funkciji `model`. Želimo prilagoditi energiju međudjelovanja E_{in} u ovisnosti o R_0 iz jednadžbe (4.23) s našom krivuljom `model`. Podatke koje želimo prilagoditi dobivamo pomoću funkcije `PDE1d2electronsCM.PDE1d2eCMf` tako da izračunamo vlastite energije za jednadžbu (4.23) s međudjelovanjem `enea` i bez međudjelovanja `ene_0a` koje međusobno oduzmemo kako bih dobili energiju međudjelovanja `ene_ina`. Funkcija `model` unosi naše podatke `x` i parametre `a` i `b` koje želimo odrediti. Funkcija `curve_fit` iz paketa `scipy.optimize` određuje iz naših podataka i modela vrijednosti parametara `a` i `b` i matricu na čijoj se dijagonali nalaze kvadrati standardnih pogrešaka naših parametara. Pomoću funkcije `axs.plot` iz paketa `matplotlib.pyplot` crtamo graf naših podataka i graf naše krivulje `model`.

Dodatak C Matematički izvodi

Jednadžbu (3.7) dobivamo tako što u definiciju jednočestične matrice gustoće za dva fermiona uvrštavamo valnu funkciju (3.6).

$$\begin{aligned} \rho(\phi', \phi) &= 2 \int_0^{2\pi} \psi^*(\phi', \phi_2) \psi(\phi, \phi_2) d\phi_2 = \\ &= 2 \left| \frac{i}{\pi\sqrt{2}} \right|^2 \int_0^{2\pi} d\phi_2 \operatorname{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right)\right) e^{-i\frac{m}{2}(\phi' + \phi_2)} \sin\left(\frac{n}{2}(\phi' - \phi_2)\right) \\ &\quad \operatorname{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi - \phi_2}{2}\right)\right) e^{i\frac{m}{2}(\phi + \phi_2)} \sin\left(\frac{n}{2}(\phi - \phi_2)\right) \end{aligned}$$

$\phi < \phi'$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi^2} e^{im\frac{\phi - \phi'}{2}} \left(\int_0^\phi d\phi_2 \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) - \int_\phi^{\phi'} d\phi_2 \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) \right. \\ \left. + \int_{\phi'}^{2\pi} d\phi_2 \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) \right) \end{aligned}$$

$$y(\phi_2) = \operatorname{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right)\right) \operatorname{sgn}\left(\sin\left(\frac{\phi - \phi_2}{2}\right)\right) \quad (\text{C.1})$$

Funkcija (C.1) je prikazana na slikama C.1 za $\phi < \phi'$ gdje su $\phi \in (0, 2\pi)$ i $\phi' \in (0, 2\pi)$. Površina ispod grafa C.1 je $2\pi - 2(\phi' - \phi)$.

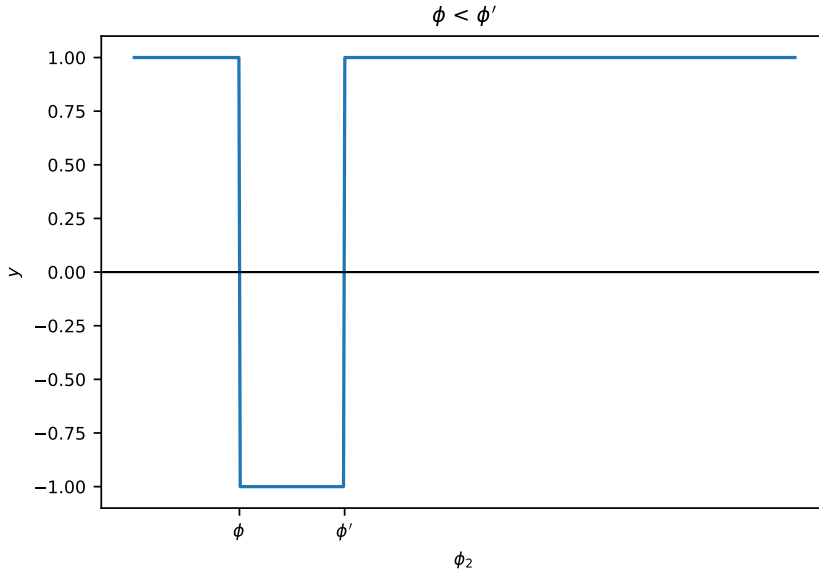
$\phi < \phi'$:

$$\frac{1}{\pi^2} e^{im\frac{\phi - \phi'}{2}} \left(\int_0^{2\pi} d\phi_2 \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) - 2 \int_\phi^{\phi'} d\phi_2 \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) \right)$$

Korištenjem trigonometrijskog identiteta

$$2 \sin\left(n\frac{\phi - \phi_2}{2}\right) \sin\left(n\frac{\phi' - \phi_2}{2}\right) = \cos\left(n\frac{\phi - \phi'}{2}\right) - \cos\left(n\frac{\phi + \phi'}{2} - n\phi_2\right)$$

dobivamo:



Slika C.1: Funkcija (C.1) gdje je $\phi < \phi'$

$\phi < \phi'$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi^2} e^{im \frac{\phi - \phi'}{2}} & \left(\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi_2 \cos\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) + \frac{1}{2n} \int_0^{2\pi} d\phi_2 \cos\left(n \frac{\phi + \phi'}{2} - n\phi_2\right) \right. \\ & \left. - \int_\phi^{\phi'} d\phi_2 \cos\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) - \frac{1}{n} \int_\phi^{\phi'} d\phi_2 \cos\left(n \frac{\phi + \phi'}{2} - n\phi_2\right) \right) \end{aligned}$$

m je cijeli broj, dok je n pozitivni cijeli broj.

$\phi < \phi'$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi^2} e^{im \frac{\phi - \phi'}{2}} & \left(\pi \cos\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) + \frac{1}{2n} 0 - (\phi' - \phi) \cos\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) - \frac{1}{n} (\sin\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) - \sin\left(n \frac{\phi' - \phi}{2}\right)) \right) = \\ & \frac{1}{\pi^2} e^{im \frac{\phi - \phi'}{2}} \left((\pi + \phi - \phi') \cos\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) - \frac{2}{n} \sin\left(n \frac{\phi - \phi'}{2}\right) \right) \end{aligned}$$

$$\rho_{m,n}(\phi', \phi) = \frac{1}{\pi^2} e^{i \frac{m}{2} (\phi - \phi')} \begin{cases} (\pi + \phi - \phi') \cos\left(\frac{n}{2} (\phi - \phi')\right) - \frac{2}{n} \sin\left(\frac{n}{2} (\phi - \phi')\right) & \text{za } \phi < \phi' \\ (\pi + \phi' - \phi) \cos\left(\frac{n}{2} (\phi - \phi')\right) + \frac{2}{n} \sin\left(\frac{n}{2} (\phi - \phi')\right) & \text{za } \phi \geq \phi' \end{cases}$$

Raspodjela po kutnoj količine gibanja (3.8) dobivamo pomoću definicije (2.8).

Zamjenom varijabli $u = \phi - \phi'$ i $v = \frac{1}{2}(\phi + \phi')$ dobivamo:

$$\phi' = v - \frac{u}{2}$$

$$\phi = v + \frac{u}{2}$$

$$\phi' = 0, \quad v - \frac{u}{2} = 0, \quad v = \frac{u}{2}$$

$$\phi = 0, \quad v + \frac{u}{2} = 0, \quad v = -\frac{u}{2}$$

$$\phi' = 2\pi, \quad v - \frac{u}{2} = 2\pi, \quad v = \frac{u}{2} + 2\pi$$

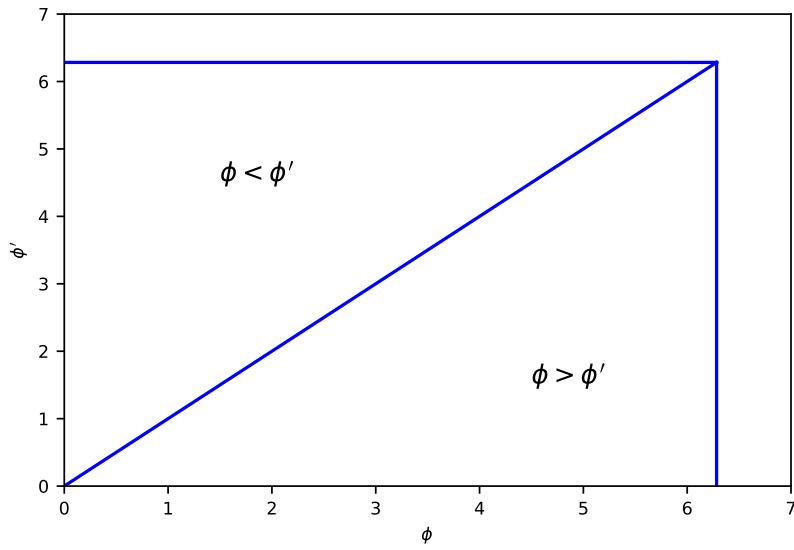
$$\phi = 2\pi, \quad v + \frac{u}{2} = 2\pi, \quad v = -\frac{u}{2} + 2\pi$$

$$d\phi' d\phi = \left| \begin{vmatrix} \frac{\partial \phi'}{\partial v} & \frac{\partial \phi'}{\partial u} \\ \frac{\partial \phi}{\partial v} & \frac{\partial \phi}{\partial u} \end{vmatrix} \right| dv du = \left| \begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{vmatrix} \right| dv du = \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right| dv du = dv du$$

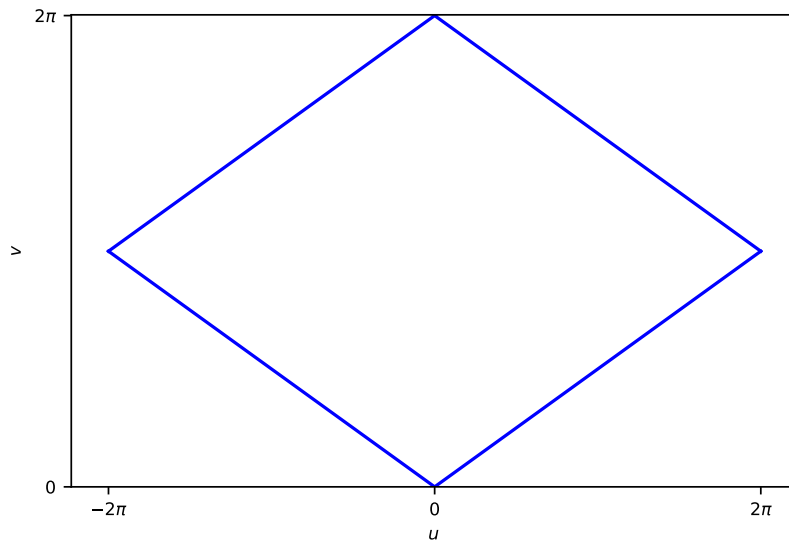
Površina po kojoj integriramo u ϕ i ϕ' koordinatnom sustavu je prikazana na slici C.2,

dok je površina po kojoj integriramo u u i v koordinatnom sustavu je prikazana na slici C.3.

$$e^{-ilu} \rho_{m,n}(u) = \frac{1}{\pi^2} e^{i(\frac{m}{2}-l)u} \begin{cases} (\pi + u) \cos(\frac{n}{2}u) - \frac{2}{n} \sin(\frac{n}{2}u) & \text{za } u < 0 \\ (\pi - u) \cos(\frac{n}{2}u) + \frac{2}{n} \sin(\frac{n}{2}u) & \text{za } u \geq 0 \end{cases}$$



Slika C.2: Površina u ϕ i ϕ' koordinatnom sustavu



Slika C.3: Površina u u i v koordinatnom sustavu

$$\begin{aligned}
 n(l) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' d\phi e^{il(\phi' - \phi)} \rho(\phi', \phi) = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-2\pi}^0 du \int_{-\frac{u}{2}}^{\frac{u}{2} + 2\pi} dv e^{-ilu} \rho_{m,n}(u) + \int_0^{2\pi} du \int_{\frac{u}{2}}^{-\frac{u}{2} + 2\pi} dv e^{-ilu} \rho_{m,n}(u) \right) = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-2\pi}^0 du \int_{-\frac{u}{2}}^{\frac{u}{2} + 2\pi} dv \frac{1}{\pi^2} e^{i(\frac{m}{2} - l)u} \left((\pi + u) \cos\left(\frac{n}{2}u\right) - \frac{2}{n} \sin\left(\frac{n}{2}u\right) \right) \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{2\pi} du \int_{\frac{u}{2}}^{-\frac{u}{2} + 2\pi} dv \frac{1}{\pi^2} e^{i(\frac{m}{2} - l)u} \left((\pi - u) \cos\left(\frac{n}{2}u\right) + \frac{2}{n} \sin\left(\frac{n}{2}u\right) \right) \right)
 \end{aligned}$$

Na kraju slijedi:

$$\begin{aligned}
n(l) = & \frac{2e^{-i\pi(2l-m)}}{n\pi^3} \left(\frac{1}{(n^2 - (m-2l)^2)^3} n \cos(n\pi) (-16l^4\pi + 32l^3m\pi - 24l^2m^2\pi + 8lm^3\pi \right. \\
& \left. + e^{2i\pi(2l-m)} (\pi(n^4 - (m-2l)^4) - 16in^2(2l-m)) + 32iln^2 - m^4\pi - 16imn^2 + n^4\pi) \right. \\
& - \frac{1}{((m-2l)^2 - n^2)^3} 2(\sin(n\pi)(16l^4 - 32l^3m + 24l^2m^2 - 24l^2n^2 - 8lm^3 - in^2\pi(2l-m)((m-2l)^2 - n^2) \\
& \left. + 24lmn^2 + m^4 - 6m^2n^2 - 3n^4) + n\pi(2l-m+n)(-2l+m+n)((m-2l)^2 + 5n^2)e^{i\pi(2l-m)} \right. \\
& \left. + e^{2i\pi(2l-m)} \sin(n\pi)(16l^4 - 32l^3m + 24l^2m^2 - 24l^2n^2 - 8lm^3 + in^2\pi(2l-m)((m-2l)^2 - n^2) + 24lmn^2 \right. \\
& \left. \left. + m^4 - 6m^2n^2 - 3n^4) \right) \right)
\end{aligned}$$

Bibliography

- [1] A. Lorke, R. Johannes Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, “Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 2223–2226, Mar 2000.
- [2] Y. Aharonov and D. Bohm, “Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory,” *Phys. Rev.*, vol. 115, pp. 485–491, Aug 1959.
- [3] K. Jiménez-García, L. J. LeBlanc, R. A. Williams, M. C. Beeler, A. R. Perry, and I. B. Spielman, “Peierls substitution in an engineered lattice potential,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 225303, May 2012.
- [4] S. Viefers, P. Koskinen, P. S. Deo, and M. Manninen, “Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 21, no. 1, pp. 1 – 35, 2004.
- [5] M. Manninen, S. Viefers, and S. Reimann, “Quantum rings for beginners ii: Bosons versus fermions,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 46, pp. 119 – 132, 2012.
- [6] K. Burke, J. P. Perdew, and M. Levy, “Semilocal density functionals for exchange and correlation: Theory and applications,” in *Modern Density Functional Theory* (J. Seminario and P. Politzer, eds.), vol. 2 of *Theoretical and Computational Chemistry*, pp. 29–74, Elsevier, 1995.
- [7] doc. dr. sc. Maja Planinić, “Predavanja iz metodika nastave fizike,” <http://metodika.phy.hr/claroline/claroline/document/document.php?cidReset=true&cidReq=MET1N>.