H-atom v homogenem elektricnem polju za osnovno stanje

Jernej G.

June 8, 2003

Zgoraj nevedeni problem je bilo treba resevati s perturbacijsko metodo. Torej zapisimo Hamiltoljan za H-atom v homogenem elektricnem polju, ki kaze v z-smeri:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - e\xi z,$$

in njegovo energijo za osnovno stanje:

$$E_1 = E_1^{(0)} + < 1, 0, 0| - e\xi z|1, 0, 0 >,$$

kjer smo locili energijo H-atoma in elektricno polje. Valovna funkcija osnovnega stanja je:

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)^1 Y_{l,m}(\theta, \phi)^2,$$

ali s ket:

$$|n, l, m > \; ; \qquad n = 1, l = 0, m = 0$$

Na zalost je prvi red energije enak nic:

$$\int_{-a}^{a} soda \cdot liha \cdot soda \, dx = 0.$$

[1] $R_{1,0} = \frac{2}{r_B^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{r_B}}$

[2] $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

Zato si moramo pomagati z drugim redom:

$$E_1 = E_1^{(0)} + (-|E_1^{(2)}|);$$

$$-|E_1^{(2)}| = \sum_{n' \neq 1, l', m'} \frac{|<1,0,0| - e\xi z|n', l'm'>|^2}{E_1 - E_{n'}},$$

kjer ne smemo pristeti stanja, po katerem razvijamo: $n = 1$.

Pokusimo sedaj oceniti drugi red popravka:

1. omejimo ga navzdol:

$$|E_1^{(2)}| > \sum_{l', m'} \frac{|<1,0,0| - e\xi z|1, l'm'>|^2}{E_2 - E_1} \quad ^3.$$

   Kaj ostane?

$$<1,0,0| - e\xi z|2,1,-1> \; = \; <1,0,0| - e\xi z|2,1,1> \; = \; 0 \quad ;$$

$$(Y_{1,-1} = \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{i\phi} \qquad \text{in} \qquad \textstyle\int_0^{2\pi} e^{im\phi}\, d\phi = 0, \qquad m \neq 0)$$

$$<1,0,0| - e\xi z|2,0,0> = 0 \quad ^4$$

$$\begin{aligned} <1,0,0|z|2,1,0> \;&=\; \int R_{1,0}^* Y_{0,0}^* \cdot r\cos\theta \cdot R_{2,1} Y_{1,0} \cdot r^2 \cos\theta \, dr d\phi d\theta \\ &=\; \sqrt{\frac{2^{15}}{3^{10}}} \cdot r_B, \end{aligned}$$

   kjer se sem vposteval:

[3] Sestejemo le stanja z n=2 (torej so le 4 cleni)
[4] Zaradi parnosti kot na strani 1

(a)

$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}(2r_B)^{-\frac{3}{2}} \cdot \frac{r}{r_B} e^{-\frac{r}{2r_B}}$$

(b)

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos\theta$$

Torej:

$$|E_1^{(2)}| > \frac{2^{15} \cdot (e\xi r_B)^2}{3^{10} \cdot (E_2 - E_1)}$$

2. in se navzgor:

$$|E_1^{(2)}| < \sum_{n',l',m'} \frac{| < 1,0,0| - e\xi z|n', l'm' > |^2}{E_2 - E_1} \quad {}^5;$$

kjer je $< 1,0,0| - e\xi z|1,0,0 >= 0$ in pogoj: $n \neq 1$ ni vec potreben. To je pomembno, saj vemo, da je

$$\sum_{n'l',m'} |n', l', m' >< n', l', m'| = 1.$$

Poenostaljena energija izgleda nekako takole:

$$\frac{(-e\xi)^2}{E_2 - E_1} \cdot < 1,0,0|z^2|1,0,0 >= \frac{(e\xi r_B)^2}{E_2 - E_1}$$

Ob zdruzitvi tocke 1. in 2. dobimo interval, kjer se nahaja II. red popravka enrgije H-atoma v elektricnem homogenem polju:

$$\frac{2^{15} \cdot (e\xi r_B)^2}{3^{10} \cdot (E_2 - E_1)} < |E_1^{(2)}| < \frac{(e\xi r_B)^2}{E_2 - E_1}.$$

[5] To je lahko najvecja mozna energija: $E_2 - E_1 \approx 0$.