Perturbacije energij prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma v šibkem električnem polju

Matej Bobnar

26. junij 2003

Naloga:
Izračunaj popravke energij in lastne funkcije prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma v šibkem homogenem zunanjem elektirčnem polju. Uporabi najnižji red teorije motnje, ki da netrivialne rezultate.

Rešitev:
Začnemo z zapisom Hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - e\mathcal{E}z, \tag{1}$$

kjer velja

$$-e\mathcal{E}z = V'. \tag{2}$$

Zanimali se bomo le za stanja:

$\mid 200 >$
$\mid 211 >$
$\mid 210 >$
$\mid 21-1 >$,

ki imajo vsa enako energijo, če ni nobene zunanje motnje. Vpeljemo matriko popravkov za vsa ta štiri stanja, katere elemente izračunamo tako:

$$< 2lm \mid V' \mid 2l'm' > . \tag{3}$$

Pri računanju teh elementov si pomagamo s formulo $\int e^{im\varphi}d\varphi = 2\pi\delta_{m,0}$, saj pri računanju vsakega elementa računamo tudi tole:

$$\int e^{-im\varphi}e^{im'\varphi}d\varphi = \int e^{i(m'-m)\varphi}d\varphi = 2\pi\delta_{m,m'}. \tag{4}$$

To pokaže, da so od nič različni le elementi, kjer $m = m'$. Za diagonalne elemente pa je očitno, da vedno integriramo liho funkcijo $(zY^*_{l,m}Y_{l,m})$ po celem območju in so zato tudi enaki nič. S tem ugotovimo, da je edini od nič različena element $-e\mathcal{E} < 210 \mid z \mid 200 >$, ki ga moramo izračunati. Za to bomo potrebovali sledeče funkcije:

$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{2r_B})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{r_B}e^{-\frac{r}{2r_B}} \tag{5}$$

$$R_{2,0} = 2(\frac{1}{2r_B})^{\frac{3}{2}}(1-\frac{r}{2r_B})e^{-\frac{r}{2r_B}} \tag{6}$$

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \tag{7}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \tag{8}$$

$$z = r\cos\theta. \tag{9}$$

Torej ta element je:

$$-e\mathcal{E} < 210 \mid z \mid 200 >= \quad (10)$$

$$= -e\mathcal{E}\int R^*_{2,1}Y^*_{1,0}zR_{2,0}Y_{0,0}r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr = \quad (11)$$

$$= -e\mathcal{E}\int \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{2r_B})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{r_B}e^{-\frac{r}{2r_B}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\ r\cos\theta$$

$$2(\frac{1}{2r_B})^{\frac{3}{2}}(1-\frac{r}{2r_B})e^{-\frac{r}{2r_B}}\sqrt{\frac{1}{4\pi}}r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr = \quad (12)$$

$$= -e\mathcal{E}(\frac{1}{2r_B})^3\frac{1}{r_B}\int_0^\infty r^4(1-\frac{r}{2r_B})e^{-\frac{r}{r_B}}dr\int_{-1}^{1}\cos^2\theta d(\cos\theta) = \quad (13)$$

$$= -\frac{e\mathcal{E}}{2^3}r_B\int\frac{r^4}{r_B^4}(1-\frac{r}{2r_B})e^{-\frac{r}{r_B}}\frac{dr}{r_B}\frac{2}{3} = \quad (14)$$

$$= -\frac{e\mathcal{E}}{2^3}r_B\frac{2}{3}[\int x^4e^{-x}dx - \frac{1}{2}\int x^5e^{-x}dx] = \quad (15)$$

$$= -\frac{e\mathcal{E}r_B}{12}(4! - \frac{1}{2}5!) = -\frac{e\mathcal{E}r_B}{12}(24-60) = \quad (16)$$

$$= +3e\mathcal{E}r_B \quad (17)$$

Končno poznamo vse elemente v matriki popravkov V, ki je 4x4 matrika zgoraj desno:

$$\left[\begin{array}{c|cccc} 00 & 0 & 0 & 3e\mathcal{E}r_B & 0 \\ 11 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 3e\mathcal{E}r_B & 0 & 0 & 0 \\ 1-1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline lm/l'm' & 00 & 11 & 10 & 1-1 \end{array}\right].$$

Matriko V diagonaliziramo.

$$det(V - I\lambda) = \lambda^4 - (3e\mathcal{E}r_B)^2\lambda^2 \quad \rightarrow \quad (18)$$

$$\lambda_{3,4} = 0 \quad (19)$$

$$\lambda_1 = -3e\mathcal{E}r_B \quad (20)$$

$$\lambda_2 = +3e\mathcal{E}r_B. \quad (21)$$

Od tu pa dobimo pripadajoče lastne vektorje po standardnem postopku:

$$\vec{a_1}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

in

$$\vec{a_2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Vidimo, da se prvotno 4x degenerirano stanje razcepi v tri stanja. Stanje $\frac{1}{\sqrt{2}}(| 200 > - | 210 >)$, ki pripada pozitivni lastni vrednosti, ima za $e\mathcal{E}r_B$ višjo energijo kot stanji $| 211 >$ in $| 21-1 >$, ki ostaneta nespremenjeni. Stanje $\frac{1}{\sqrt{2}}(| 200 > + | 210 >)$, pa ima za prav toliko nižjo energijo.

Splošni izrek Imejmo Hamiltonian v obliki enačbe (1). V' (2) predstavlja neko motnjo, ostalo pa označimo s $\mathcal{H}_0$. Iz analize vemo, da vedno obstaja tak operator, imenujmo ga L_z, da sta komutatorja $[\mathcal{H}_0, L_z]$ in $[V', L_z]$ enaka nič. Za naš primer je to operator projekcije vrtilne količine L_z. Za prvi komutator že vemo, da je enak nič. Poglejmo pa si še drugega:

$$< nlm | V'L_z - L_zV' | n'l'm' >= \tag{22}$$

$$-\hbar m < nlm | V' | n'l'm' > +\hbar m' < nlm | V' | n'l'm' >= \tag{23}$$

$$\hbar < nlm | V' | n'l'm' > (m' - m). \tag{24}$$

Za primer vzemimo spin pri prejšnji nalogi. Tokrat je operator S_z. Zaradi izreka velja, da $[\mathcal{H}_0, S_z] = 0 \text{in} [V', S_z] = 0$. Od tu dobimo, da je

$$< nlms | V' | n'l'm's' > (s' - s) = 0. \tag{25}$$

Iz česar sledi, da dobimo enako matriko za spin gor in spin dol, oziroma matriko 8x8:

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \uparrow & V & 0 \\ \hline \downarrow & 0 & V \\ \hline & \uparrow & \downarrow \end{array}\right].$$