Perturbacija V

Barbara Šetina

junij 2003

1 Naloga

Kako se razcepi prvo vzbujeno stanje vodikovega atoma (z elektronom brez spina) v šibkem homogenem magnetnem in električnem polju? Smer električnega polja je pravokotna na smer magnetnega polja.

2 Rešitev

Na predavanjih smo zapisali "dodatek"k Hamiltonianu, kadar imamo magnetno in električno polje. Na hitro ponovimo...

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e_0\vec{A})^2 + e\Phi + \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{1}$$

Pri tem je $\vec{A}$ seveda vektorski potencial, Φ električni potencial, ker imamo vodikov atom (en elektron, en proton) pa potrebujemo za popoln opis seveda tudi Coulombski potencial.
Vektorski potencial je tak:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B} \tag{2}$$

Ko to vstavimo v prvi člen zgoraj opisanega Hamiltoniana (smo naredili na predavanjih), upoštevamo, da je $\vec{B} = (0, 0, B)$ in $\Phi = Ex$, ker je $\vec{E} = (E, 0, 0)$, dobimo:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - eEx - \frac{e}{2m}(\vec{L}\vec{B}) + \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2) \tag{3}$$

Prispevek k Hamiltonianu zaradi električnega in magnetnega polja označimo s črto, upoštevajmo, da je

$$\vec{L}\vec{B} = BL_z \quad \text{in} \quad L_z = \imath\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{4}$$

pa imamo:

$$H' = -eEx - \imath\hbar\frac{eB}{2m}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2) \tag{5}$$

Računali bomo v prvem redu perturbacije, zato člen s kvadratom magntenega polja zanemarimo. Dodatek k Hamiltonianu je potem le še

$$H' = -eEx - \imath\hbar\frac{eB}{2m}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6}$$

Valovne funkcije za vodikov atom imamo podane v sferičnih koordiantah, zato v sferične koordinate spravimo tudi Hamiltonian s črtico:

$$H' = -eEr\sin\theta\cos\phi - \imath\hbar\frac{eB}{2m}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{7}$$

Prvo vzbujeno stanje vodikovega atoma je štririkrat degenerirano, lastne funkcije pa so (prepišemo iz primerne knjige...)

$$\begin{aligned}
|2 \quad 0 \quad 0> &= R_{20}Y_{00} = 2(2r_B^{-3/2})(1-\frac{r}{2r_B})\exp(-r/2r_B)\sqrt{\frac{1}{4\pi}} && (8)\\
|2 \quad 1-1> &= R_{21}Y_{1-1} = 3^{-1/2}(2r_B^{-3/2})\frac{r}{r_B}\exp(-r/2r_B)\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(-\imath\phi) && (9)\\
|2 \quad 1 \quad 0> &= R_{21}Y_{10} = 3^{-1/2}(2r_B^{-3/2})\frac{r}{r_B}\exp(-r/2r_B)\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta && (10)\\
|2 \quad 1 \quad 1> &= R_{21}Y_{11} = -3^{-1/2}(2r_B^{-3/2})\frac{r}{r_B}\exp(-r/2r_B)\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(\imath\phi) && (11)\\
& && (12)
\end{aligned}$$

Vse lastne funkcije imajo enako lastno energijo, ta je:

$$W_n = -\frac{W_r}{n^2} \quad W_r = \frac{e^4 m}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \tag{13}$$

Pri tem je W_r Rydbergova energija, n pa seveda 2.
Predpostavimo, da sta magnetno in električno polje majhni in ju obravnavamo kot perturbacijo. Sestavimo matriko

$$< 2lm|H'|2l'm' >=< 2lm| - eEr\sin\theta\cos\phi|2l'm' > - < 2lm|\frac{eB}{2m}L_z|2l'm' > \tag{14}$$

To izračunamo seveda takole:

$$< 2lm|H'|2l'm' >= \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}(\cos\theta)\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r R_{2l}Y_{lm}^*H'R_{2l'}Y_{l'm'} \tag{15}$$

Poglejmo najprej diagonalne elemente, $l = l'$ in $m = m'$! Pri členu z električnim poljem bi od $-\pi$ do π integrirali funkcijo $\cos\phi$, kar nam da seveda ničlo. Člen z magnetnim poljem pa nam da 0 pri funkcijah $|200>$ in $|210>$, kjer kotni del ni odvisen od ϕ in je zato odvod seveda 0. Kaj pa dobimo pri $|21\pm1>$? V pomoč nam bo naslednje:

$$L_z|2lm >= \hbar m|2lm > \tag{16}$$

Za diagonalne člene torej dobim:

$$< 21\pm1| - \frac{eB}{2m}L_z|21\pm1 >= -\frac{eB}{2m} < 21\pm1|\hbar(\pm1)21\pm1 >= -\frac{eB}{2m}\hbar(\pm1) \tag{17}$$

Kaj pa izvendiagonalni? Poglejmo najprej člen z električnim poljem!
Pa pojdimo po vrsti!

$$< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|211 > \tag{18}$$

Pri tem matričnem elementu integriramo po ϕ

$$\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\phi \cos\phi \exp(\imath\phi) = \pi \tag{19}$$

Po θ imamo naslednji integral:

$$\int_{0}^{\pi} \sin^3(\theta)\mathrm{d}\theta = \frac{4}{3} \tag{20}$$

(En sinus dobimo od potenciala, drugega od valovne funkcije, tretjega pa zaradi sferičnih koordinat.)
Ostane samo še integral po r:

$$\int_{0}^{\infty} (1 - \frac{r}{2r_B})\frac{r}{r_B} \exp(-r/r_B) r^3 \mathrm{d}r = -36 r_B^4 \tag{21}$$

Poberemo še konstante, matrični element je

$$< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|211 >= 48\sqrt{2}eEr_B \tag{22}$$

Sledi $< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|210 >$. Ta je enak 0, saj integriramo $\cos\phi$ od $-\pi$ do π.
Kaj pa $< 211| - eEr\sin\theta\cos\phi|210 >$? Tudi ta je enak 0, saj po spremenljivki θ integriramo izraz $\sin^2\theta\cos\theta$, kar nam da ničlo. Še trije ostanejo...
$< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|210 >$ nam prav tako ne prinese ničesar, saj je integral po θ spet enak nič (tokrat integriramo $\sin\theta\cos\theta$). Prav tako sta nič matrična elementa $< 211| - eEr\sin\theta\cos\phi|21 - 1 >$ (zaradi integrala po ϕ, integriramo $\cos\phi\exp(-2\imath\phi)$) in $< 210| - eEr\sin\theta\cos\phi|21 - 1 >$.
Izračunati moramo še $< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|21 - 1 >$. Dobimo isto kot pri $< 200| - eEr\sin\theta\cos\phi|211 >$, le z minusom.
Pogledati moramo še, kaj naredi magnetno polje. Diagonalne elemente matrike so izračunali že prej. Pa ostali? Odvajamo po ϕ, tako da bodo enaki nič vsi tisti, kjer ϕ ne nastopa. To so $< 21 \pm 1|H_B|200 >, < 210|H_B|200 >, < 21 \pm 1|H_B|210 >$ in $< 200|H_B|210 >$. S H_B sem označila prispevek k Hamiltonianu zaradi magnetnega polja. Ko za vse ostale pogledamo, kaj nam prinese kotni del, ugotovimo, da so vsi členi enaki 0, saj je

$$\int_{-\pi}^{\pi} \exp(\imath m\phi) = 2\pi\delta_{m,0} \tag{23}$$

Zapišimo matriko!

$$\begin{pmatrix} 0 & c & 0 & -c \\ c & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -c & 0 & 0 & a \end{pmatrix} \tag{24}$$

Pri tem je $c = 48\sqrt{2}eEr_B$, $a = \hbar eB/(2m)$ Lastne vrednosti in pripadajoči lastni vektorji te matrike so:

$$\lambda_1 = 0 \tag{25}$$
$$\vec{a_1} = (\frac{a}{c}, 1, 0, 1) \tag{26}$$
$$\lambda_2 = 0 \tag{27}$$
$$\vec{a_2} = (0, 0, 1, 0) \tag{28}$$

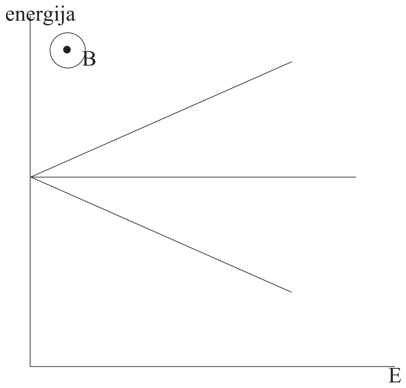
$$\lambda_3 = -\sqrt{a^2+2c^2} \quad (29)$$

$$\vec{a_3} = \left(\frac{a+\sqrt{a^2+2c^2}}{c}, \frac{c^2+a^2+a\sqrt{a^2+2c^2}}{c^2}, 0, 1\right) \quad (30)$$

$$\lambda_4 = \sqrt{a^2+2c^2} \quad (31)$$

$$\vec{a_4} = \left(\frac{a-\sqrt{a^2+2c^2}}{c}, -\frac{c^2+a^2-a\sqrt{a^2+2c^2}}{c^2}, 0, 1\right) \quad (32)$$

Prvo vzbujeno stanje se torej razcepi na 3 stanja z različno energijo, kot kaže slika:



Slika 1: Razcep prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma v šibkem homogenem magnetnem in električnem polju.

Pri tem osnovno energijo obdržita stanji

$$N(\frac{a}{c}|200> + |211> + |21-1>) \quad \text{in} \quad |210> \quad (33)$$

Energija se zviša stanju

$$N(\frac{a-\sqrt{a^2+2c^2}}{c}|200> - \frac{c^2+a^2-a\sqrt{a^2+2c^2}}{c^2}|211> + |21-1>) \quad (34)$$

Zniža pa se za stanje

$$N(\frac{a-\sqrt{a^2+2c^2}}{c}|200> - \frac{c^2+a^2-a\sqrt{a^2+2c^2}}{c^2}|211> + |21-1>) \quad (35)$$

Pri tem sem z N označila normalizacijsko konstanto, ki jo dobimo, ko normiramo lastne vektorje.