Perturbacija II

Lap Franc

21. junij 2004

Naloga

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

Rešitev

Vodikov atom ima v prvem vzbujenem stanju osem degeneracijskih stanj (posamezna stanja zapišemo z $|n, l, m_l, m_s>$; glavno kvantno število je povsod enako, zato ne vpliva na degeneracijo; projekcija spina elektrona v z smeri nam podvoji degeneracijo pri naslednjih stanjih):
$|l, l_m>$
$|0, 0>$
$|1, -1>$
$|1, 0>$
$|1, 1>$

Lastne energije vodikovega atoma v prvem vzbujenem stanju brez motnje iščemo z nastavkom

$$E_n{}^{(0)}\psi = H_0\psi$$
oz.
$$< n_0|E_n{}^{(0)}|m_0 >=< n_0|H_0|m_0 > \text{ v matrični obliki,}$$

kjer so $E_n{}^{(0)}$ energije lastnih stanj, ki so vse enake, in je H_0 Hamiltonijan za vodikov atom brez električnega potenciala.

Hamiltonijan za naš primer zapišemo

$$H = H_0 + H'$$

Dodatno energijo Hamiltonijana zapišemo $H' = eU$;
$E = -\nabla U \quad \Rightarrow \quad U = -Ez$

$$H' = -eEz$$

Pri računanju upoštevamo osno simetrijo okoli osi z, zato se l_z ohranja. Posledica tega je, da H in l_z komutirata: $[H, L_z] = 0 \Rightarrow [H', L_z] = 0$. Pravtako je $[H, S_z] = 0$, saj spin v motnji ne nastopa.

Rešitve komutatorja

$$< n = 2, l, m, m_s|[H, L_z]|l', m', m'_s >= 0$$
$$< l, m, m_s|[H_0, L_z]|l', m', m'_s > + < l, m, m_s|[H', L_z]|l', m', m'_s >= 0$$

Iščemo rešitve drugega člena, ker iščemo popravke k lastnim energijam:

$$< l, m, m_s|[H', L_z]|l', m', m'_s >= 0$$
$$[H', L_z] = H'L_z - L_zH' = 0$$
$$< l, m, m_s|H'L_z|l', m', m'_s > - < l, m, m_s|L_zH'|l', m', m'_s >= 0$$

Operator L_z deluje na obhodno magnetno kvantno število m; če je na levi v produktu, deluje levo, drugače desno.

$$\hbar m' < l, m, m_s|H'|l', m', m'_s > -\hbar m < l, m, m_s|H'|l', m', m'_s >= 0$$

$$\hbar < l, m, m_s|H'|l', m', m'_s > (m' - m) = 0 \quad (1)$$

Izračun nam da dvoje možnosti:

1. Kadar $m' = m$, je lahko matrični element različen od 0; to tudi pomeni, da se komponenta l_z ohranja;
2. Če pa $m' \neq m$, mora biti matrični element enak 0.

Enak rezultat in pogoje dobimo za spinsko kvantno število:

$$< l, m, m_s|H'|l', m', m'_s > (m_s - m'_s) = 0 \quad (2)$$

Najprej odpravimo elemente z različnim spinskim številom (2). Izvendiagonalni podmatriki 4×4 imata elemente enake 0; diagonalni sta enaki, ker spinsko število ne nastopa v motnji.

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} m_s = 1/2 & m_s = -1/2 \end{array} \\ \begin{array}{c} m_s = 1/2 \\ m_s = -1/2 \end{array} & \begin{bmatrix} \mathrm{A} & 0 \\ 0 & \mathrm{A} \end{bmatrix} \end{array}$$

Lotimo se še podmatrike A z obhodnim magnetnim številom. Iz (1) sledi:

$lm \backslash l'm'$	00	11	10	1-1
00	a	0	α	0
11	0	b	0	0
10	α^*	0	c	0
1-1	0	0	0	d

Če pogledamo še parnost funkcij (če $\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \quad \Rightarrow \quad f(\vec{r}) \rightarrow -f(-\vec{r})$ liha parnost), iz katerih izračunamo diagonalne elemente, vidimo da so lihe parnosti. Integriral lihe funkcije je 0 po celem prostoru. Tako so a,b,c,d tudi enaki 0.

Matrika H' je sicer hermitska, vendar je α realna, zato sta α in α^* enaka.

Torej izračunajmo še element α v matriki.

$$< n,l,m|H'|n',l',m' >= -eE \int {\Psi_{nlm}}^* z \Psi_{n'l'm'} dV$$
$$\Psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm}$$

Za izračun potrebujemo sledeče funkcije:

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

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

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

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

$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$

$$\alpha = -eE < 200|rcos\vartheta|210 >=$$
$$= -\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{(-e_0)E}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d(cos\vartheta) \int_0^{\infty}(1 - \frac{r}{2r_B})e^{\frac{-r}{r_B}}\frac{r}{r_B}r^3 cos^2\vartheta dr$$

Rezultat je:

$$\alpha = -3e_0 E r_B$$

Matriki izračunamo še lastne vrednosti in lastne vektorje. Lastne vrednosti pokažejo, za koliko se je spremenila energija posameznega degeneriranega stanja, lastni vektorji pa nam dajo funkcije k pripadajoči lastni vrednosti.

$$det(A - \lambda I) = 0$$
$$\lambda^4 - (3eEr_B)^2\lambda^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_{1,2} = 0; \quad \lambda_{3,4} = \pm\alpha$$

$$\lambda = 0 \quad \vec{a}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{in} \quad \vec{a}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\lambda = \alpha \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\lambda = -\alpha \quad \vec{a}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Na začetku smo imeli en energijski nivo, sedaj imamo tri različne. Zgornji in spodnji se dvigne oz. spusti za α, srednji ostane pri enaki energiji.

$$\begin{array}{cccc}
 & \cdots & \frac{1}{\sqrt{2}}(|00>-|10>) & 2\times \\
\text{začetni nivo} & \cdots & |11> \text{ in } |1\text{-}1> & \text{4 funkcije} \\
 & \ddots & \frac{1}{\sqrt{2}}(|00>+|10>) & 2\times
\end{array}$$