Časovno odvisna perturbacija

31. maj 2007

Naloga

Vodikov atom je v homogenem električnem polju

$E(t) = E_0 \frac{1}{1+(\frac{t}{\tau})^2}$.

Kolikšna je verjetnost, da je atom ob $t = \infty$ v prvem vzbujenem stanju, če je bil ob $t = -\infty$ v osnovnem stanju? Pri katerem τ je ta verjetnost največja? Predpostavi, da je električno polje dovolj šibko, da lahko uporabiš perturbacijsko teorijo.

Rešitev

Hamiltonjan zapišemo kot vsoto Hamiltonjana nezmotenega sistema in časovno odvisne motnje v smeri osi z:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - eE(t)z = H_0 + H'(t), \tag{1}$$

kjer je

$$H'(t) = -eE(t)z. \tag{2}$$

Časovno odvisno funkcijo prvotnega stanja lahko zapišemo kot vsoto stanj

$$|\psi, t >= \sum_n c_n(t)|n, t > . \tag{3}$$

Časovni odvod koeficientov novih stanj se glasi

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t) < m, t|H'(t)|n, t > . \tag{4}$$

Zgornjo enačbo integriramo po času od $-\infty$ do poljubnega časa t in dobimo

$$c_m(t) = c_m(-\infty) - \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \sum_n c_n(t) < m,t|H'(t)|n,t > dt. \tag{5}$$

Naša motnja je dovolj šibka, da se s časom koeficient $c_n(t)$ ne spreminja veliko, zato ga zamenjamo kar s $c_n(-\infty)$.

Ob času $t = -\infty$ je vodikov atom le v osnovnem stanju $n = 1$; $l = 0$; $m_l = 0$; m_s. Projekcijo spina na os z ($m_s = \pm\frac{1}{2}$) si lahko izberemo, saj potencial ne vpliva na njegovo smer. Recimo da je atom na začetku v stanju $c_{n,l,m_l,m_s} = c_{1,0,0,\frac{1}{2}}$. Pod integralom torej nimamo več vsote, temveč le en člen.

Ob času $t = \infty$ nas zanima prvo vzbujeno stanje $n = 2$; $l = 0, 1$; m_l; m_s. Projekcija spina se ne spremeni, torej ostane $m_s = \frac{1}{2}$.

$$c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(\infty) = c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(-\infty) - \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} c_{1,0,0,\frac{1}{2}}(-\infty) < 2,l,m_l,\frac{1}{2},t|-eE(t)z|1,0,0,\frac{1}{2},t > dt. \tag{6}$$

Na začetku je bil atom le v osnovnem stanju, zato je prvi člen na desni $c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(-\infty) = 0$ in $c_{1,0,0,\frac{1}{2}}(-\infty) = 1$.

$$c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} < 2,l,m_l,\frac{1}{2},t| - eE(t)z|1,0,0,\frac{1}{2},t > dt. \tag{7}$$

Poiščimo še velikost tirne vrtilne količine l vzbujenega stanja. Če hočemo, da je integral različen od nič, mora biti parnost izraza pod integralom enaka 1.

$< 2,l,m_l,\frac{1}{2},t| \to (-1)^l$; $z \to -1$; $|1,0,0,\frac{1}{2},t > \to (-1)^0$

$\Rightarrow (-1)^l(-1)(-1)^0 = (-1)^{l+1} \Rightarrow l = lih$

Ker lahko v našem primeru izbiramo velikosti tirne vrtilne količine le med 0 in 1, je torej $l = 1$.

Zaradi valjne simetrije velja $[H', L_z] = 0 \Rightarrow \hbar(m_l' - m_l) < l', m_l'|H'(t)|l, m_l >= 0$ (izpeljano že pri vaji Perturbacija II).

Torej morata biti projekciji vrtilne količine obeh stanj enaki. Upoštevamo še časovni razvoj in zapišemo izraz pod integralom iz enačbe (7):

$$< 2,1,0,\frac{1}{2},t|-eE(t)z|1,0,0,\frac{1}{2},t >= -eE(t) < 2,1,0,\frac{1}{2}|e^{i\frac{E_2}{\hbar}t} z e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}|1,0,0,\frac{1}{2} >, \tag{8}$$

kjer sta $E_1 = -13,6eV$ in $E_2 = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{1}{4}13,6eV$ energiji osnovnega in prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma.

Enačbo (7) sedaj zapišemo kot

$$c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty) = \frac{i}{\hbar} e < 2,1,0,\frac{1}{2}|z|1,0,0,\frac{1}{2} > \int\limits_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t} dt. \tag{9}$$

Označimo $\omega = \frac{E_2-E_1}{\hbar}$. Izračunati moramo integral kompleksne funkcije, ki ima singularnosti v točkah $\pm i\tau$:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{1+(\frac{t}{\tau})^2} dt \tag{10}$$

Integral kompleksne funkcije po sklenjeni poti je enak vsoti residuumov v polih znotraj zanke. Integriramo torej po celotni realni osi časa. Da pot sklenemo, imamo za integracijo dve možnosti, in sicer polkrožno po zgornji ali po spodnji kompleksni polravnini. Če izberemo spodnjo ($e^{i\omega(-it)} = e^{\omega t}$) in pošljemo $t \to \infty$ eksponent divergira. Na zgornji polravnini pa gre eksponent ($e^{i\omega(it)} = e^{-\omega t}$) proti nič, če $t \to \infty$. Za zaključitev integracije po sklenjeni poti izberemo torej polkrog po zgornji polravnini.

$$\oint \frac{E_0 e^{i\omega t}}{1+(\frac{t}{\tau})^2} dt = E_0 2\pi i Res(\frac{e^{i\omega t}}{(1+\frac{it}{\tau})(1-\frac{it}{\tau})})|_{i\tau} = E_0 2\pi i Res(\frac{\tau^2 e^{i\omega t}}{(t-i\tau)(t+i\tau)})|_{i\tau} =$$

$$= E_0 2\pi i (\frac{\tau^2 e^{i\omega t}}{(t+i\tau)})|_{i\tau} = E_0 \pi\tau e^{-\omega\tau}$$

Braket izračunamo tako, da integriramo po sferičnih harmonikih, ki jih sedaj poznamo, operator z pa nadomestimo z $r\cos\vartheta$.

$$< 2,1,0,\frac{1}{2}|z|1,0,0,\frac{1}{2} >= \int R_{21}^* Y_{10}^* r\cos\vartheta R_{10} Y_{00} r^2 dr d\varphi d(\cos\vartheta) = \frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tag{11}$$

Koeficient vzbujenega stanja po času $t = \infty$ se torej glasi:

$$c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty) = \frac{i}{\hbar} e E_0 \pi \frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tau e^{-\omega\tau} \tag{12}$$

Verjetnost, da se atom po času $t = \infty$ nahaja v prvem vzbujenem stanju pa je:

$$P(t=\infty, n=2) = |c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty)|^2 = (\frac{eE_0\pi}{\hbar}\frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tau e^{-\omega\tau})^2 \tag{13}$$

Izračunajmo še, pri katerem τ je ta verjetnost največja. Odvajamo verjetnost P po τ in poiščemo ničlo (ekstrem od P):

$$\frac{dP}{d\tau} = (\frac{eE_0\pi}{\hbar}\frac{128}{243}\sqrt{2} r_B)^2 (2\tau e^{-2\omega\tau} - 2\tau\omega e^{-2\omega\tau}) = 0 \tag{14}$$

Verjetnost doseže maksimum v točki:

$$\tau_{max} = \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{E_2 - E_1} \tag{15}$$