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.

Izračun

Zunanje električno polje orientirajmo tako, da kaže v smeri z osi: $\vec{E} = E\,\vec{e}_z$. Tedaj lahko zapišemo celoten Hamiltonjan elektrona kot:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - eEz \;= H_0 + V$$

kjer smo s H_0 označili Hamiltonjan nemotenega vodikovega atoma, z $V = -eEz$ pa motnjo. Rešitve nezmotenega sistema H_0 poznamo (glej prejšnjo nalogo) – lastne funkcije so

$$\langle r|nlm\rangle = \psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

kjer so R_{nl} rešitve radialnega dela stacionarne Schrödingerjeve enačbe, Y_{lm} pa krogelne funkcije.
V tej nalogi iščemo popravke prvega vzbujenega stanja – torej so možna kvantna števila:

$$n=2, \qquad l=\begin{matrix}0\\1\end{matrix}, \qquad m=\begin{matrix}0\\-1,0,1\end{matrix}, \qquad s=1/2, \qquad m_s=\begin{matrix}1/2\\-1/2\end{matrix},$$

To stanje je osemkrat degenerirano – uporabimo prvi red degenerirane perturbacije. Teh osem stanj se razlikuje po kvantnih številih l, m in m_s, zato bomo označevali stanja z $|lmm_s\rangle$. Matrični elementi motnje

$$\langle lmm_s|-eEz|l'm'm_s'\rangle$$

tvorijo matriko dimenzije 8 × 8, katere lastne vrednosti predstavljajo popravke k lastnim energijam nezmotenega sistema, lastni vektorji pa so popravljene lastne funkcije prvega vzbujenega stanja. Matriko shematično razdelimo na štiri bloke:

$$\begin{array}{c|cccc|cccc}
 & |00\uparrow\rangle & |11\uparrow\rangle & |10\uparrow\rangle & |1{-1}\uparrow\rangle & |00\downarrow\rangle & |11\downarrow\rangle & |10\downarrow\rangle & |1{-1}\downarrow\rangle \\
|00\uparrow\rangle & & & & & & & & \\
|11\uparrow\rangle & & & & & & & & \\
|10\uparrow\rangle & & & & & & & & \\
|1{-1}\uparrow\rangle & & & & 1. & 2. & & & \\
\hline
|00\downarrow\rangle & & & & 3. & 4. & & & \\
|11\downarrow\rangle & & & & & & & & \\
|10\downarrow\rangle & & & & & & & & \\
|1{-1}\downarrow\rangle & & & & & & & &
\end{array}$$

Izračunati torej moramo 64 elementov! A ker je operator H_0 hermitski (tudi matrika motnje je tako hermitska), so elementi pod diagonalo kompleksno konjugirani svojim ustreznikom nad njo – tako moramo izračunati le 36 elementov. Simetrija Hamiltonjana nam pove, da z dodatkom motnje postane problem valjno simetričen okrog izbrane osi z. Klasično: z komponenta vrtilne količine je konstanta gibanja, kvantno pa to izrazimo s komutatorjem:

$$[V, L_z] = 0$$

Za L_z smo namreč že pokazali, da komutira s H_0, za komutator $[L_z, z]$pa se je trivialno prepričati, da je tudi enak nič $(L_z \propto (xd_y - yd_x))$. Torej smo prišli domzaključka, da je tudi slednji izraz enak nič:

$$\begin{aligned}
&\langle lmm_s | [V, L_z] | l'm'm'_s \rangle = \\
&= \langle lmm_s | [VL_z - L_z V] l'm'm'_s \rangle = \\
&= \langle lmm_s | V | L_z l'm'm'_s \rangle - \langle L_z^+ lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = \\
&= m'\mathbf{h} \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle - m\mathbf{h} \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = \\
&= \mathbf{h}(m' - m) \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = 0
\end{aligned}$$

kjer smo upoštevali $L_z^+ = L_z$. Koristna informacija za našo 8 x 8 matriko: od nič različni so le tisti matrični elementi, za katere velja $m = m'$! Podobno naredimo za komutator $[V, \check{S}]$, ki je prav tako enak nič. Dobimo ven $\langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = 0$ za $m_s \neq m_s$.

Ne smemo pozabiti, da Hamiltonjan ne deluje na spinski del valovnih funkcij. Tako bodo matrični elementi, kjer imata funkciji različna spinska dela (kvadrant 2 in 3), enaki nič, saj velja $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0$. Prav tako ugotovimo, da bosta bloka 1 in 4 enaka, saj je $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$.

Za krogelno simetričen potencial V = V(r) imajo lastne funkcije dobro definirano parnost (t.j. sprememba predznaka pri transformaciji $r \to -r$). Integrand oblike:

$$\int y^*_{nlm} z y_{n'l'm'} d^3 r$$

ima tedaj parnost očitno $p = (-1)^l (-1)(-1)^{l'} = (-1)^{l+l'+1}$. Upoštevajmo še dejstvo, da je integral funkcije z liho parnostjo po celotnem območju enak nič, in vidimo, da so tudi vsi diagonalni matrični elementi enaki nič.

Če si ponovno ogledamo matriko motnje

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc}
0 & 0 & \times & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \vdots & \ddots & \\
\times & 0 & 0 & 0 & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\
\hline
0 & \cdots & & 0 & & & \\
\vdots & \ddots & & & & & \\
0 & & & 0 & & &
\end{array}\right)$$

vidimo, da je tako od nič različen le matrični element

$$\langle 00|V|10\rangle = \langle 10|V|00\rangle = -eE\int y^{*}_{nlm}\, z\, y_{n'l'm'}\, d^3 r$$

Če raje zapišemo v krogelnih koordinatah:

$$\langle 00|V|10\rangle = -eE\int R_{20}(r)Y_{00}(J,j)\, r\cos J R_{21}(r)Y_{10}(J,j)\, r^2 \sin J dr dJ dj$$

V računu nastopajo sledeče funkcije

$$R_{20}(r) = \frac{2}{(2r_b)^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2r_b}\right)\exp\left(-\frac{r}{2r_b}\right)$$
$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{(2r_b)^{3/2}}\frac{r}{r_b}\exp\left(-\frac{r}{2r_b}\right)$$
$$Y_{00}(J,j) = \frac{1}{\sqrt{4p}}$$
$$Y_{10}(J,j) = \sqrt{\frac{3}{4p}}\cos J$$

kjer je r_b Bohrov radij. Integrala ne bomo računali, povedali bomo samo rešitev. Končni rezultat je tako $\langle 00|V|10\rangle = -3eEr_b$. Če še enkrat zapišem sedaj našo pomembno 4 x 4 podmatriko:

	$\|00\uparrow\rangle$	$\|11\uparrow\rangle$	$\|10\uparrow\rangle$	$\|1-1\uparrow\rangle$
$\|00\uparrow\rangle$	0	0	$-3eEr_B$	0
$\|11\uparrow\rangle$	0	0	0	0
$\|10\uparrow\rangle$	$-3eEr_B$	0	0	0
$\|1-1\uparrow\rangle$	0	0	0	0

Vidimo, da lastni stanji $|11\rangle$ *in* $|1-1\rangle$ ostaneta nespremenjeni, drugi dve pa se mešata. Za nas pomembna matrika je torej:

$$\begin{pmatrix} 0 & -3eEr_b \\ -3eEr_b & 0 \end{pmatrix}$$

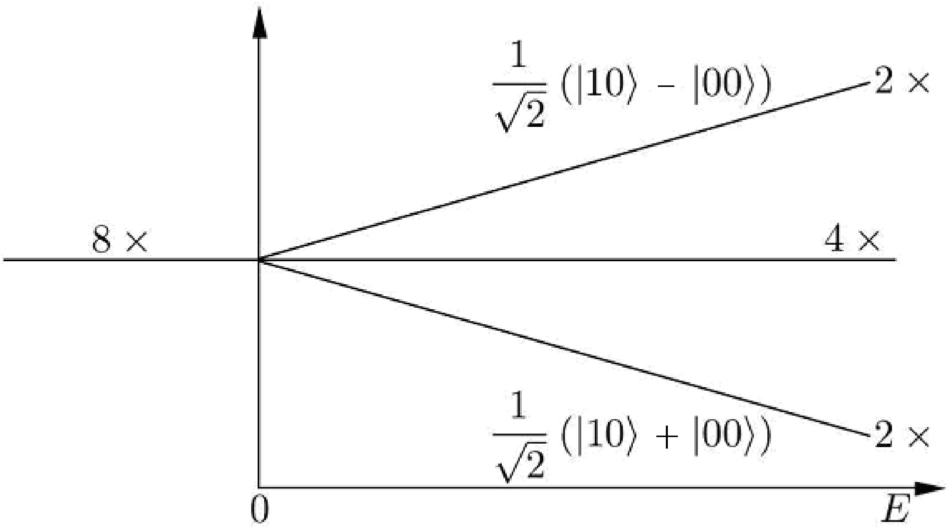
Za lastni vrednosti razberemo

$$l_{1,2} = \pm 3eEr_b$$

s pripadajočima lastnima vektorjema

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ in } v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Energijski nivo se nam torej razcepi na tri nivoje. Eden ohrani isto energijo in je štirikrat degeneriran, eden linearno narašča, drugi pa pada z večanjem jakosti zunanjega polja in sta dvakrat degenerirana.



Slika: Degeneracija prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma pred in po vklopitvi zunanjega električnega polja. Razlika med nivoji se spreminja linearno z večanjem jakosti polja.