

Časovno odvisna perturbacija V

Valenčič Nika

12.05.2008

1 Naloga

Vodikov atom je v homogenem električnem polju

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

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.

2 $P(|2, l, m \rangle)_{t=\infty} = ?$

Vemo, da se vodikov atom v času $t = -\infty$ nahaja v osnovnem stanju, torej $|\psi \rangle = |1, 0, 0 \rangle$. Zanima pa nas verjetnost, da se vodikov atom v $t = \infty$ nahaja v prvem vzbujenem stanju, $n = 2$. Zaradi degeneracije, so za $n = 2$ možna štiri vzbujena stanja z $l = 0, 1$ in $m = -1, 0, 1$.

Začnimo najprej tako, da zapišemo Hamiltonovo funkcijo.

$$H = H_0 + V(t) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eE(t)z \quad (2)$$

kjer $V(t) = -eE(t)z$ predstavlja motnjo v smeri osi z .

Za nemoten vodikov atom poznamo rešitve Schrödingerjeve enačbe

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= H_0 \psi \\ |n, l, m, t \rangle &= |n, l, m, 0 \rangle e^{\frac{-i}{\hbar} E_n^0 t} \end{aligned}$$

Valovno funkcijo zmotenega stanja pa lahko zapišemo kot

$$|\psi, t \rangle = \sum_n c_n(t) |n, t \rangle \quad (3)$$

Če (3) vstavimo s Schrödingerjevo enačbo dobimo diferencialno enačbo za koeficiente $c_n(t)$, ki se glasi

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\partial c_{n,l,m}(t)}{\partial t} = \sum_{n',l',m'} \langle n', l', m', t' | V(t') | n, l, m, t' \rangle c_{n',l',m'}(t) \quad (4)$$

le to pa lahko preoblikujemo v integralno enačbo.

$$c_{n,l,m}(t) = c_{n,l,m}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \sum_{n',l',m'} \langle n', l', m', t' | V(t') | n, l, m, t' \rangle c_{n',l',m'}(t) \quad (5)$$

Ob predpostavki, da je motnja šibka in se člen $c_{n',l',m'}(t)$ s časom drastično ne spreminja, ga lahko prepisemo v obliko $c_{n',l',m'}(t_0)$.

V našem primeru nas zanima verjetnost, da se delec nahaja v prvem vzbujenem stanju. To pa se da zapisati s koeficienti $c_{n,l,m}(t)$, in sicer

$$P(|2, l, m, t = \infty \rangle) = |c_{2,l,m}^2|_{t=\infty} \quad (6)$$

Enačbo (5) lahko za naš primer prepisemo v

$$c_{2,l,m}(t) = c_{2,l,m}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \sum_{n',l',m'} \langle n', l', m', t' | V(t') | n, l, m, t' \rangle c_{n',l',m'}(t_0) \quad (7)$$

Opazimo, da je $c_{2,l,m}(t_0) = 0$, saj se sistem v času $t = t_0 = -\infty$ nahaja v stanju $|1, 0, 0 \rangle$. Poleg tega pa je še člen $c_{n',l',m'}(t_0)$ različen od nič le takrat, ko je $n' = 1, l' = 0, m' = 0$ ($c_{1,0,0}(-\infty) = 1$). Iz tega sledi, da nam v celotni vsoti ostane le en člen.

$$c_{2,l,m}(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle 1, 0, 0, t' | V(t') | 2, l, m, t' \rangle \quad (8)$$

Zapišemo še časovni razvoj stanj in izpostavimo člene, ki niso odvisni od časa.

$$\begin{aligned} c_{2,l,m}(\infty) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{\frac{i}{\hbar} E_1^0 t'} e^{-\frac{i}{\hbar} E_2^0 t'} \langle 1, 0, 0 | -ez \frac{E_0}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} | 2, l, m, \rangle \\ c_{2,l,m}(\infty) &= \frac{ieE_0}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'} \langle 1, 0, 0 | \frac{z}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} | 2, l, m \rangle \\ c_{2,l,m}(\infty) &= \frac{ieE_0}{\hbar} \langle 1, 0, 0 | z | 2, l, m \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} \end{aligned} \quad (9)$$

Na tem mestu moramo rešiti integral $\int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2}$ in ovrednotiti matrični element $\langle 1, 0, 0 | z | 2, l, m \rangle$, ki se ga bomo najprej lotili.

Če želimo imeti ne ničeln matrični element mora biti parnost matričnega elementa enaka 1. Parnost lastnih funkcij vodikovega atoma je

$$\psi = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \rightarrow (-1)^l$$

Torej velja

$$\begin{aligned} |1, 0, 0\rangle &\rightarrow 1 \\ z &\rightarrow -1 \\ |2, l, m\rangle &\rightarrow (-1)^l \end{aligned}$$

Ker želimo, da ima naš matrični element parnost 1, je možna velikost vrtilne količine le

$$\mathbf{l} = \mathbf{1}$$

Kakšni pogoji pa veljajo za z-komponentno vrtilne količine?

Iz valjne simetrije sledi, da je

$$\int 1e^{im\varphi} d\varphi \neq 0, \quad za \quad \mathbf{m} = \mathbf{0}$$

Zdaj lahko ovrednotimo matrični element $\langle 1, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle$.

$$\langle 1, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle = \int R_{*2,1} Y_{*1,0} r \cos\vartheta R_{1,0} Y_{0,0} r^2 dr d\varphi d(\cos\vartheta) = \sqrt{\frac{2^{15}}{3^{10}}} r_B \quad (10)$$

Izračunati moramo še integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} dt'$$

ki se ga lotimo s kompleksno integracijo. Ta integral ima pole v točkah $t = \pm i\tau$. Ker velja, da je integral kompleksne funkcije po sklenjeni poti enak vsoti residuuov v polih znotraj krivulje, si moramo izbrati zaključeno krivuljo. Integriramo po celotni realni osi in pot zaključimo s polkrožnico, ki gre čez **spodnjo** kompleksno polravnino. Spodnjo polravnino si izberemo zato, ker se želimo znebiti kompleksnega dela v integralu. Velja

$$e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 (-i\tau)} = e^{\frac{3}{4\hbar} E_1^0 \tau}.$$

ker je energija osnovnega stanja vodikovega atoma negativna, $\mathbf{E}_1^0 < \mathbf{0}$.

Ko pošljemo $\tau \rightarrow \infty$, eksponent pada proti nič. Če pa bi integrirali po zgornji polravnini bi eksponent, ko gre $\tau \rightarrow \infty$ divergiral.

$$\begin{aligned} \oint \frac{e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} dt' &= 2\pi \text{Res}_{-i\tau} \left(\frac{e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{1 + (\frac{t'}{\tau})^2} \right) \\ &= 2\pi \text{Res} \left(\frac{\tau^2 e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{(t' + i\tau)(t' - i\tau)} \right) \Big|_{-i\tau} \\ &= 2\pi \frac{\tau^2 e^{\frac{3i}{4\hbar} E_1^0 t'}}{t - i\tau} \Big|_{-i\tau} \\ &= -\pi\tau e^{\frac{3}{4\hbar} E_1^0 \tau} \end{aligned}$$

Prišli smo do konca.

$$c_{2,1,0}(\infty) = -\sqrt{\frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{ieE_0\pi}{\hbar}} r_B \tau e^{\frac{3}{4\hbar} E_1^0 \tau} \quad (11)$$

Verjetnost, da se vodikov atom v $t = \infty$ nahaja v $|2, 1, 0\rangle$ je

$$P = |c_{2,1,0}(\infty)|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^2} r_B^2 \tau^2 e^{2 \frac{3}{4\hbar} E_1^0 \tau} \quad (12)$$

3 Pri katerem τ je $P(|2, l, m, t = \infty\rangle)$ največja?

Po τ odvajamo izraz (12).

$$\frac{dP}{d\tau} \propto 2\tau e^{\frac{3}{2\hbar} E_1^0 \tau} + \tau^2 \frac{2E_1^0}{2\hbar} e^{\frac{3}{2\hbar} E_1^0 \tau} \quad (13)$$

Iščemo maksimalno vrednost, zato nas zanima $\frac{dP}{d\tau} = 0$. Možne rešitve so

$$\tau_1 = 0, \quad \tau_2 = \infty, \quad \tau_3 = -\frac{4\hbar}{3E_1^0}$$

Pri τ_1 in τ_2 dobimo minimum, torej je pravilni odgovor

$$\tau_{MAX} = -\frac{4\hbar}{3E_1^0} = \frac{\hbar}{E_2^0 - E_1^0}$$

kjer je E_2^0 energija prvega vzbujenega stanja in E_1^0 energija osnovnega stanja vodikovega atoma.