Domača naloga iz Kvantne mehanike I

Degenerirana perturbacija IV

Denis Brojan, 14. maj, 2008

Povzetek

Izračunaj popravke energij in lastne funkcije prvega vzbujenega stanja izotropnega tridimenzionalnega harmonskega oscilatorja,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2,$$

v homogenem zunanjem električnem polju. Uporabi najnižji red teorije motenj, ki da netrivialne rezultate.

1 Točna rešitev

Označimo z m maso delca v harmoničnem potencialu, s q njegov naboj in z E velikost vektorja jakosti električnega polja, ki je usmerjen v smer osi z. Hamiltonov operator za delec se tedaj glasi:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2 + z^2\right) - qEz.$$

Z upoštevanjem definicij komponent gibalnih količin, moremo zapisati stacionarno Schrödingerjevo enačbo za tridimenzionalni harmonični oscilator takole

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right)\psi + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - qEz\right)\psi = \epsilon\psi, \quad (1)$$

kjer je ϵ pripadajoča energija lastnega stanja ψ. Člena v zadnjem oklepaju na levi strani enačbe, ki vsebujeta z, oblikujemo v kvadrat dvočlenika.

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - qEz &= \frac{1}{2}m\omega^2\left[\left(z - \frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2E^2}{m^2\omega^4}\right] \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2\left(z - z_0\right)^2 - \frac{1}{2}qEz_0\end{aligned}$$

Posebej smo označili $z_0 = \frac{qE}{m\omega^2}$. V enačbo (1) uvedimo še novo spremenljivko $\xi = z - z_0$, da zgostimo zapis.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial \xi^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2 + \xi^2\right)\psi = \left(\epsilon + \frac{1}{2}qEz_0\right)\psi$$

Slednjo prepoznamo kot enačbo za tridimenzionalni harmonični oscilator v koordinatah (x, y, ξ). Lastne vrednosti energije takoj sledijo:

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_\xi} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_\xi + \frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2}qEz_0,$$

kjer n_x, n_y, n_ξ tečejo $0, 1, 2, \ldots$ Električno polje torej prispeva k energijam prvega vzbujenega stanja (ki je trikrat degenerirano) natanko $-qEz_0/2$.

2 Perturbacija prvega reda

Hamiltonov operator razcepimo na vsoto operatorjev $H^0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega\mathbf{r}^2$ in $H^1 = -qEz$, pri čemer drugega razumemo kot perturbacijski prispevek. Prvo vzbujeno stanje prostega harmonskega oscilatorja je trikrat degenerirano. Energiji $\epsilon_1^0 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ namreč ustrezajo tri različne kombinacije kvantnih števil n_x, n_y, n_z, in sicer

$$\begin{aligned}
|100\rangle &= \psi_a(x,y,z) = \varphi_1(x)\varphi_0(y)\varphi_0(z),\\
|010\rangle &= \psi_b(x,y,z) = \varphi_0(x)\varphi_1(y)\varphi_0(z),\\
|001\rangle &= \psi_c(x,y,z) = \varphi_0(x)\varphi_0(y)\varphi_1(z),
\end{aligned}$$

kjer so φ_0 in φ_1 osnovna in prva vzbujena stanja enodimenzionalnega prostega harmonskega oscilatorja. V spremenljivki x se ti dve funkciji glasita:

$$\begin{aligned}
\varphi_0(x) &= A_0 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}},\\
\varphi_1(x) &= A_1 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x.
\end{aligned}$$

A_0 in A_1 sta ustrezni normalizacijski konstanti. Nemudoma lahko pričnemo računati elemente matrike $W_{i,j} = \langle\psi_i| H^1 |\psi_j\rangle$, kjer $i, j = a, b, c$. Za pokušino izračunajmo prvi diagonalni element in enega izvendiagonalnega!

$$\begin{aligned}
W_{11} = \langle 100| H^1 |100\rangle &= -qE\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^2(x)\varphi_0^2(y)\varphi_0^2(z)z\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\\
&= -qE\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^2(x)\,\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^2(y)\,\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^2(z)z\,\mathrm{d}z = 0\\
W_{21} = \langle 010| H^1 |100\rangle &= -qE\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0(x)\varphi_1(x)\,\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1(y)\varphi_0(y)\,\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^2(z)z\,\mathrm{d}z = 0
\end{aligned}$$

Ker je vselej vsaj en od integralskih faktorjev ničeln, (bodisi gre za skalarni produkt ortogonalnih funkcij bodisi za integral v simetričnih mejah lihe funkcije), lahko ugotovimo, da so vsi elementi matrike enaki nič. Posledično so nič tudi njene lastne vrednosti, zato prvi perturbacijski približek ne da netrivialnih popravkov k energijam prvega vzbujenega stanja. Velja opozoriti, da je natančen račun pokazal, da so popravki k energijam degeneriranih stanj enaki v vseh treh primerih, in sicer $-qEz_0/2$. Energijskega razcepa degeneriranih nivojev v zunanjem električnem polju torej ni.[1]

[1]Naloga je po dogovoru z asistentom le delno rešena. Popravke drugega reda avtor ni računal.