Cwiczenia 17

28 kwietnia 2014
21:31

Rachunek zaburzeń z degeneracją

Załóżmy że dla $|n\rangle, |l\rangle$, $E_n = E_l$. Nie możemy użyć poprzednich wzorów. Intuicja:

mając samo H_0 każda kombinacja liniowa

$c_n|n\rangle + c_l|l\rangle$ jest wektorem własnym o energii $E_n = E$

Drobna poprawka $\lambda H'$ może wyróżnić pewne wektory z tej podprzestrzeni, to powoduje że startując z pewnego wektora $|n\rangle$ mamy gwałtowną nieciągłą zmianę stanu. Trzeba więc startować z odpowiednich wektorów, których zmiana będzie ciągła w λ.

Warunek z rach. zaburzeń:

$$(H_0 - E^{(0)})|\psi_1\rangle = (E^{(1)} - V)|\psi_0\rangle$$

Weźmy $|\psi_0\rangle = c_n|n\rangle + c_l|l\rangle$ wstawmy do (1)

i obłóżmy z lewej $\langle n|$ i $\langle l|$

$$\begin{cases} \langle n| E^{(1)} - V |\psi_0\rangle = 0 \\ \langle l| E^{(1)} - V |\psi_0\rangle = 0 \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{pmatrix} \langle n|V|n\rangle - E^{(1)} & \langle n|V|l\rangle \\ \langle l|V|n\rangle & \langle l|V|l\rangle - E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_l \end{pmatrix} = 0$$

Czyli przepis:

$$\begin{pmatrix} \langle n|V|n\rangle & \langle n|V|l\rangle \\ \langle l|V|n\rangle & \langle l|V|l\rangle \end{pmatrix} \; ; \quad \text{szukamy wart. własnych i wekt. własnych}$$

Rozwiązanie istnieje tylko jeśli:

$$(\langle n|H'|n\rangle - \xi_1)(\langle l|H'|l\rangle - \xi_1) - |\langle n|H'|l\rangle|^2 = 0$$

$$\xi_1^{\pm} = \frac{1}{2}\left(\langle n|H'|n\rangle + \langle l|H'|l\rangle \pm \sqrt{(\langle n|H'|n\rangle - \langle l|H'|l\rangle)^2 + 4|\langle n|H'|l\rangle|^2}\right)$$

1. Oscylator 2D:

$$V'(x,y) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2+y^2) + \underbrace{\alpha x y}_{H', \text{ zaburzenie}}$$

znajdź w pierwszym rzędzie poprawki do stanu podstawowego i pierwszego wzbudzonego.

- stan podstawowy $|n_x = 0, n_y = 0\rangle$

$E_0^{(1)} = \langle 0,0| \alpha x y |0,0\rangle = 0$

- stan I-szy wzbudzony:

$|0,1\rangle, \quad |1,0\rangle$ podwójna degeneracja

$\langle 0,1| H' |0,1\rangle = 0$

$\langle 1,0| H' |1,0\rangle = 0$

$$\langle 1,0| \alpha \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} (a_x + a_x^\dagger)(a_y + a_y^\dagger) |0,1\rangle = \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}$$

$$\frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

wektory własne:

$|\psi_+^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,1\rangle)$

$E_+^{(1)} = \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}$

$|\psi_-^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle - |0,1\rangle)$

$E_-^{(1)} = -\frac{\hbar\alpha}{2m\omega}$

To są stany z których powinniśmy startować robiąc rachunek zaburzeń:

Moglibyśmy nie rozwiązać ściśle:

$$\frac{1}{2} m\omega^2 \left(x^2 + y^2 + \frac{2\alpha x y}{m\omega^2}\right) = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(2p\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 + 2(1-p)\left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2\right)$$

$$p - 2(1-p) = \frac{2\alpha}{m\omega^2} \qquad p = \frac{\alpha}{2m\omega^2} + \frac{1}{2}$$

$$\omega_1 = \omega\sqrt{\frac{\alpha}{m\omega^2} + 1} \qquad \omega_2 = \omega\sqrt{1 - \frac{\alpha}{m\omega^2}}$$

$$E = \hbar\omega\sqrt{\frac{\alpha}{m\omega^2} + 1}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\sqrt{1 - \frac{\alpha}{m\omega^2}}\left(n_2 + 1\right)$$

[illegible]

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\sqrt{\frac{\alpha}{m\omega^2}+1} + \sqrt{1-\frac{\alpha}{m\omega^2}}\right) \approx \ldots$$ liniowe w α

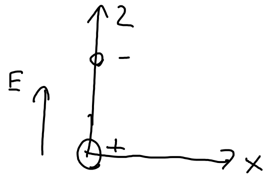
$$E_{1,+} \approx \hbar\omega\,\frac{3}{2}\left(\cdot\left(1+\frac{\alpha}{2m\omega^2}\right)\right) + \hbar\omega\,\frac{1}{2}\left(1-\frac{\alpha}{2m\omega^2}\right) =$$
$$= \frac{5}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \qquad \text{ok}$$
$$E_{1,-} \approx \frac{5}{2}\hbar\omega - \frac{\hbar\alpha}{2m\omega}$$

2. Efekt Starka

Rozważmy atom wodoru w jednorodnym polu elektrycznym

Niech pole elektryczne będzie skierowane w kierunku osi z

$$H' = eEz = eEr\cos\theta$$



$$H = H_0 + H'$$

Jak zmieniają się poziomy energetyczne w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń?

- $n=1$ stan podstawowy $\overset{n\,l\,m}{|1,0,0\rangle}$ $\quad \varepsilon_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -13{,}6\ \text{eV}$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-r/a_0}$$

$$\varepsilon_1 = \langle 1,0,0|\, H'\, |1,0,0\rangle \propto \int d\vec{r}\ \underbrace{e^{-r/a_0}}_{\text{symetryczne}}\ \underbrace{r\cos\theta}_{\text{antysymetryczne względem inwersji}} = 0$$

- $n=2$ tu mamy problem bo mamy 4-ro krotną degenerację

$\underset{l=0}{|2,0,0\rangle}$, $\underbrace{|2,1,0\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,+1\rangle}_{l=1}$ $\qquad \varepsilon_0 = \frac{e^2}{8a_0} = -3{,}9\ \text{eV}$

W skrócie piszmy $|l,m\rangle$

Przypomnijmy sobie równanie z rachunku zaburzeń

$$\langle l,m|(H' - \varepsilon_1)|\psi_0\rangle = 0$$

$$|\psi_0\rangle = \sum_{l'm'} c_{l'm'}|l,m\rangle$$

$$\forall_{l,m} \quad \sum_{l',m'} \langle l,m|H'|l',m'\rangle c_{l',m'} - \varepsilon_1 c_{l,m} = 0$$

które wyrazy $\langle l,m|H'|l',m'\rangle$ są niezerowe?

$$|l,m\rangle = R_{2l}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$|l,m\rangle = R_{2l}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$R_{20}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$R_{21}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}\,e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$Y_{1,\pm1}$ mogą tylko z samym sobą bo inaczej $=0$

Ale z kolei $\sim \langle 1,\pm1|H'|1,\pm1\rangle \propto \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \sin^2\theta\cos\theta = \int_{-1}^{1} dt\, t(1-t^2)=0$

Jedyne niezerowe: $\langle 00|H'|1,0\rangle =$

$$=\frac{eE}{(2a_0)^3}\frac{\sqrt{3}}{2}\int dr\,\frac{r^4}{a_0\sqrt{3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{a_0}}\int d\theta \sin\theta\cos\theta^2 =$$

$$=\frac{eE}{16a_0^4}\int dr\, r^4\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\cdot e^{-\frac{r}{a_0}}\,\frac{2}{3} =$$

$$=\frac{eE}{3\cdot 8a_0^4}\cdot\left(2\cdot 4!\,a_0^5-5!\,a_0^5\right)=-3eEa_0$$

$$\left\{\begin{aligned}&\int_0^{\infty}x^k e^{-x}=\\&=-x^k e^{-x}\Big|_0^{\infty}-\\&-k\int x^{k-1}e^{-x}=\\&=k!\end{aligned}\right.$$

$$\left(\begin{array}{c|c|c|c}-\lambda_1 & -3eEa_0 & 0 & 0\\ \hline -3eEa & -\lambda_1 & 0 & 0\\ \hline 0 & 0 & -\lambda_1 & 0\\ \hline 0 & 0 & 0 & -\lambda_1\end{array}\right)\begin{pmatrix}c_{00}\\ c_{10}\\ c_{1-1}\\ c_{11}\end{pmatrix}=0$$

Niezerowe wartości własne $\pm 3eEa_0$ odpowiadają

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle-|2,1,0\rangle\right),\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle+|2,1,0\rangle\right)$$

te stany odpowiadają momentowi dipolowemu $3ea_0$ zorientowanemu odpowiednio przeciwnie i zgodnie z polem zewnętrznym. Pozostałe stany $|2,1,1\rangle, |2,1,-1\rangle$ i ich kombinacje odpowiadają stanom z momentem dipolowym skierowanym prostopadle do pola (nie znika degeneracja w pierwszym rzędzie)