Mechanika Kwantowa - kurs duży

kolokwium 2

18.12.2006. poniedziałek, godz. 14:15

sala 001B

1. Traktując sprzężenie spin-orbita jako zaburzenie

$$\hat{H}_{\mathrm{SO}} = \frac{e^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r^3}\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}\cdot\hat{S}$$

obliczyć poprawki do energii stanów $2p$.

WSKAZÓWKA: Ponieważ oddziaływanie spin-orbita jest diagonalizowane przez f. falowe w bazie całkowitego krętu j, należy najpierw skonstuować takie funkcje, a potem policzyć odpowiednie elementy macierzowe.

$$\begin{aligned}
\psi^{n=2}_{l=0,m=0} &= \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}Y^{m=0}_{l=0}(\theta,\varphi) = R_{20}(r)Y^{m=0}_{l=0}(\theta,\varphi),\\
\psi^{n=2}_{l=1,m} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}Y^{m}_{l=1}(\theta,\varphi) = R_{21}(r)Y^{m}_{l=1}(\theta,\varphi)
\end{aligned}$$

gdzie $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$.

ROZWIĄZANIE: Tworzymy funkcje własne $\hat{J}^2$, $\hat{J}_3$

$$\Psi^p_{3/2\,\pm3/2} = \psi^{n=2}_{l=1,\pm1}\chi_\pm,\quad \Psi^p_{3/2\,\pm1/2} = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=\pm1}\chi_\mp + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=0}\chi_\pm$$

oraz

$$\begin{aligned}
\Psi^p_{1/2\,1/2} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=1}\chi_- - \sqrt{\frac{1}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=0}\chi_+,\\
\Psi^p_{1/2\,-1/2} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=0}\chi_- - \sqrt{\frac{2}{3}}\psi^{n=2}_{l=1,m=-1}\chi_+.
\end{aligned}$$

Łatwo pokazać, że funkcje te są ortogonalne ze względu na część kątową. Ponieważ w tej bazie

$$\hat{L}\cdot\hat{S} = \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1)-l(l+1)-3/4) = \hbar^2\begin{cases} -1 & \text{dla} \quad j=1/2\\ 1/2 & \text{dla} \quad j=3/2\end{cases}.$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\left\langle \Psi^p_{1/2\,j_3}\middle|\,\hat{H}_{\mathrm{SO}}\,\middle|\Psi^p_{1/2\,j_3}\right\rangle &= (-1)\frac{e^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\int drr^2\frac{1}{r^3}\left|R_{21}(r)\right|^2 = -\Delta E,\\
\left\langle \Psi^p_{3/2\,j_3}\middle|\,\hat{H}_{\mathrm{SO}}\,\middle|\Psi^p_{3/2\,j_3}\right\rangle &= \left(\frac{1}{2}\right)\frac{e^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\int drr^2\frac{1}{r^3}\left|R_{21}(r)\right|^2 = \frac{1}{2}\Delta E.
\end{aligned}$$

Mamy

$$\int drr^2 \frac{1}{r^3} |R_{21}(r)|^2 = \frac{1}{24a_0^3}.$$

Wartość numeryczna

$$\Delta E = \frac{e^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\frac{1}{24a_0^3} = \frac{1}{24}\frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{\hbar}{m_ec}\right)^2\left(\frac{1}{a_0}\right)^2$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\frac{e^2}{2a_0} &= 13,6 \text{ eV} - \text{energia stanu podst. at. wodoru} \\
\frac{\hbar}{m_ec} &= 3,9 \times 10^{-11} \text{ cm} - \text{dugość Comptona fali elektronu} \\
a_0 &= 5,6 \times 10^{-9} \text{ cm} - \text{promień Bohra}
\end{aligned}$$

Stąd

$$\Delta E = 2,75 \times 10^{-5}[\text{eV}].$$

2. Elektron porusza się w polu magnetycznym skierowanym wzdłuż osi z. Znaleźć spektrum energii i degenercję poziomów.

ROZWIĄZANIE: Warto przyjąć potencjał jako

$$\vec{A} = B\begin{bmatrix} -y \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Stąd

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m_e}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 = \frac{1}{2m_e}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{qB}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] \\
&= \frac{1}{2m_e}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m_e}\hat{p}_z^2 + \frac{1}{2m_e}\hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2}\left(\frac{qB}{m_ec}\right)^2 y^2 + \frac{qB}{m_ec}y\hat{p}_x.
\end{aligned}$$

Separację zmiennych przeprowadzamy zakładając

$$\psi(x, y, z) = f(y)e^{-ip_xx/\hbar}e^{-ip_zz/\hbar}.$$

Oznaczając

$$\tilde{\omega} = \frac{qB}{m_ec}$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m_e}p_z^2 + \frac{1}{2m_e}\hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2}\tilde{\omega}^2y^2 + \tilde{\omega}yp_x + \frac{1}{2m_e}p_x^2 \\
&= \frac{1}{2m_e}p_z^2 + \frac{1}{2m_e}\hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2}\tilde{\omega}^2\left(y^2 + 2\frac{p_x}{m_e\tilde{\omega}}y + \frac{1}{m_e^2\tilde{\omega}^2}p_x^2\right).
\end{aligned}$$

Zmieniając zmienne

$$\eta = y + \frac{p_x}{m_e \tilde{\omega}}$$

otrzymujemy

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} p_z^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_\eta^2 + \frac{m_e}{2} \tilde{\omega}^2 \eta^2$$

hamiltonian oscylatora o częstości $\tilde{\omega}$ (plus ruch swobodny w kierunku z):

$$E_{N,p_z} = \hbar\tilde{\omega}\left(N + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m_e}.$$

Poziomy te są nieskończenie sdegenerowane ze względu na p_y.

3. Rozważmy nienaładowaną cząstkę o spinie 1/2, o momencie magnetycznym

$$\vec{\mu} = -2\mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{S}$$

($\vec{S}$ jest operatorem spinu), która porusza się w nieskończonej studni potencjału $-L \leq x \leq L$. W części studni o $x \leq 0$ włączono pole magnetyczne skierowane wzdłuż osi z: $\vec{B}_I = (0, 0, B)$, zaś w drugiej części dla $x \geq 0$ pole skierowane wzdłuż osi x: $B_{II} = (B, 0, 0)$. Zakładając, że pole B jest słabe wyliczyć energie w rachunku zaburzeń.

WSKAZÓWKA: Najpierw trzeba wyliczyć poziomy i f. falowe bez pola. Przydatna całka

$$\int \sin^2 x \, dx = \frac{1}{2} x - \frac{1}{4} \sin 2x.$$

ROZWIĄZANIE: Najpierw znajdujemy rozwiązanie bez pola. Funkcja znikająca w $x = -L$

$$\psi(x) = A \sin k(x + L)$$

musi spełniać warunek

$$\psi(L) = 0 \rightarrow 2kL = n\pi \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2L}.$$

Stąd unormowana f. falowa

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left[\frac{n\pi}{2L}(x + L)\right]$$

i energia

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} n^2.$$

Uwzględniając spin, mamy dwie unormowane funkcje o tej samej energii:

$$\psi_n^1(x) = \psi_n(x) \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_n^2(x) = \psi_n(x) \times \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Zaburzenie ma postać ($S_i = \hbar/2\,\sigma_i$):

$$\hat{H}' = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \begin{cases} \mu_B B\,\sigma_3 & \text{dla} \quad -L < x < 0 \\[2ex] \mu_B B\,\sigma_2 & \text{dla} \quad 0 < x < L \end{cases}.$$

Stosujemy zdegenerowany rachunek zaburzeń i wyliczamy macierz H':

$$H' = \mu_B B \left\{ \sigma_3 \int\limits_{-L}^{0} |\psi_n(x)|^2\,dx + \sigma_2 \int\limits_{0}^{L} |\psi_n(x)|^2\,dx \right\}.$$

Ponieważ każda z powyższych całek wynosi 1/2 (funkcje $|\psi_n(x)|^2$ są symetryczne i dają wkład do normy, t.j. do całki od $-L$ do L po połowie, można też wykonać całkę przy pomocy podanego we wskazówce wzoru) mamy

$$H' = \frac{\mu_B B}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Po zdiagonalizowaniu

$$\Delta E = \pm\frac{\mu_B B}{\sqrt{2}}.$$