NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 93653

Eksamen i fag SIF4047 Anvendt kvantemekanikk
Lørdag 12. mai 2001
Tid: 09.00–15.00

Tillatte hjelpemidler: (Alternativ B2): Godkjent lommekalkulator.
Rottmann, *Mathematische Formelsammlung.*
Barnett and Cronin, *Mathematical Formulae.*
Øgrim og Lian, *Størrelser og enheter i fysikk og teknikk.*

Noen nyttige konstanter	
Lyshastigheten i vakuum:	$c = 299\,792\,458\,\mathrm{m/s}$
Permeabiliteten i vakuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$
Permittiviteten i vakuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8,854 \times 10^{-12}\,\mathrm{F/m}$
Den reduserte Plancks konstant:	$\hbar = h/(2\pi) = 1,055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
Elementærladningen:	$e = 1,602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Finstrukturkonstanten:	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137,036$
Elektronmassen:	$m_\mathrm{e} = 9,109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} = 0,511\,\mathrm{MeV}/c^2$
Bohr-radien for hydrogen:	$a_0 = \hbar/(\alpha m_\mathrm{e} c) = 0,529\,\mathrm{Å}$

Oppgave 1:

Å beregne grunntilstanden for et system av N elektroner i et ytre potensial $V = V(\vec{r})$ er det samme som å finne den N-elektrontilstanden Ψ som minimaliserer forventningsverdien

$$\langle T + V + W \rangle = \langle \Psi | \, (T + V + W) \, | \Psi \rangle \ .$$

Her er T den kinetiske energien summert over alle elektronene, V er den ytre potensielle energien summert over alle elektronene, og W er vekselvirkningsenergien summert over alle par av elektroner.
Gjør *kort* rede for de grunnleggende idéene som leder til de ligningene som er oppkalt etter:
a) Thomas–Fermi; b) Hartree; c) Hartree–Fock; d) Kohn–Sham.

Oppgave 2:

Vektorpotensialet $\vec{A}(\vec{r}) = (0, Bx, 0)$ med B konstant beskriver et konstant magnetfelt i z-retningen. Her kvantiserer vi ikke feltet, men vi tar for oss et relativistisk elektron, med ladning $-e$ og masse $m = m_\mathrm{e}$, som beveger seg i dette ytre magnetfeltet.
Hamilton-operatoren er

$$H = c\,\vec{\alpha}\cdot(\vec{p} + e\vec{A}) + mc^2\beta \ ,$$

med $\vec{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$. Vi bruker standardrepresentasjonen av Dirac-matrisene:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

der $\vec{\sigma}$ og I er 2×2-matriser:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

a) Vis at p_y og p_z kan kvantiseres samtidig med H.

b) For å finne en løsning av egenverdiligningen $H\Psi = E\Psi$, med energiegenverdi E, setter vi følgelig

$$\Psi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_y y + k_z z)}\,\chi(x) \ ,$$

der k_y og k_z er konstanter. Vis at ligningen $H\Psi = E\Psi$ er ekvivalent med ligningen

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar c k_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa b \\ 0 & mc^2 & \mathrm{i}\hbar c\kappa b^\dagger & -\hbar c k_z \\ \hbar c k_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa b & -mc^2 & 0 \\ \mathrm{i}\hbar c\kappa b^\dagger & -\hbar c k_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix},$$

når vi antar at $B > 0$, og definerer $\kappa = \sqrt{2eB/\hbar}$ og

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{2}\kappa x + \frac{1}{\kappa}\left(k_y + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right), \\ b^\dagger &= \frac{1}{2}\kappa x + \frac{1}{\kappa}\left(k_y - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right). \end{aligned}$$

c) Vis at operatorene b og $b^\dagger$ oppfyller kommutasjonsrelasjonen $[b, b^\dagger] = 1$, som betyr at de er stigeoperatorer for en harmonisk oscillator.
Grunntilstanden ϕ_0 for oscillatoren er gitt ved at $b\,\phi_0(x) = 0$, mens de eksiterte tilstandene ϕ_n for $n = 1, 2, \ldots$ er gitt ved rekursjonsformelen

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\,b^\dagger\phi_{n-1}(x) \ .$$

Vis at

$$b\,\phi_n(x) = \sqrt{n}\,\phi_{n-1}(x) \ .$$

Vis at hvis vi setter

$$\begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1\phi_{n-1}(x) \\ \eta_2\phi_n(x) \\ \eta_3\phi_{n-1}(x) \\ \eta_4\phi_n(x) \end{pmatrix}$$

for $n > 0$, eller

$$\begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta_2\phi_0(x) \\ 0 \\ \eta_4\phi_0(x) \end{pmatrix}$$

for $n = 0$, der $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4$ er konstanter, så er egenverdiligningen $H\Psi = E\Psi$ ekvivalent med egenverdiligningen $A\eta = E\eta$ for 4×4-matrisen

$$A = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} \\ 0 & mc^2 & \mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -\hbar ck_z \\ \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -mc^2 & 0 \\ \mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -\hbar ck_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}.$$

d) Vis at egenverdiene til matrisen A er

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2k_z^2 + 2n\hbar c^2eB}\,.$$

Hva er degenerasjonen til hvert energinivå for det relativistiske elektronet i et konstant magnetfelt?
(Hint: det kan være nyttig å regne ut A^2 og $\mathrm{Tr}\,A$.)

e) Sammenlign med energinivåene (såkalte Landau-nivå),

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar eB}{m} + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

for en ikke-relativistisk partikkel med ladning $-e$ og masse m, men uten spinn, i et konstant magnetfelt med $B > 0$.
Gitt at forskjellen skyldes koplingen mellom spinnet til elektronet og magnetfeltet, som gir en energi $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, der $\vec{\mu}$ er det magnetiske momentet,

$$\vec{\mu} = -g_S\,\frac{e}{2m}\,\vec{S} = -g_S\,\frac{e\hbar}{4m}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix},$$

hva er så verdien av det gyromagnetiske forholdet g_S for elektronet?

f) Et typisk magnetfelt i en maskin som lager MR-bilder av mennesker ("MR"="magnetisk resonans") er $B = 1\,\mathrm{T}$.
På overflaten av en nøytronstjerne kan det hende at $B = 10^8$ T.
Vurder om elektronet kan behandles ikke-relativistisk i disse to tilfellene.

Oppgave 3:

I denne oppgaven ser vi på en prosess der et elektron fanges inn i Coulomb-feltet fra en atomkjerne, samtidig som det blir sendt ut et foton.
Det kvantiserte elektromagnetiske feltet er gitt ved at vektorpotensialet i posisjonen $\vec{r}$ er

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^{2} \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck\mathcal{V}}} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\, a_{\vec{k}\lambda} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\, a^{\dagger}_{\vec{k}\lambda} \right) .$$

Her er $\vec{k}$ bølgetallsvektoren, og $k = |\vec{k}|$. Polarisasjonsvektorene $\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}$ med $\lambda = 1, 2$ er enhetsvektorer ortogonalt på $\vec{k}$. Vi innfører et hjelpevolum $\mathcal{V} = L^3$, en terning med sidekanter L, og vi antar periodiske randkrav. Operatorene $a_{\vec{k}\lambda}$ og $a^{\dagger}_{\vec{k}\lambda}$ oppfyller kommutasjonsrelasjonene

$$[a_{\vec{k}\lambda}, a_{\vec{k}'\lambda'}] = [a^{\dagger}_{\vec{k}\lambda}, a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}] = 0 \; , \qquad [a_{\vec{k}\lambda}, a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\lambda,\lambda'} \; .$$

Den uperturberte Hamilton-operatoren

$$H_0 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar ck\, a^{\dagger}_{\vec{k}\lambda} a_{\vec{k}\lambda}$$

består av den kinetiske energien til et fritt elektron med impuls $\vec{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$, pluss energien til det frie elektromagnetiske feltet. Elektronet og det elektromagnetiske feltet er "frie" i den forstand at vi ser bort fra vekselvirkningen mellom dem.
Elektronet er til å begynne med i en tilstand gitt av bølgefunksjonen

$$\psi_b(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_b\cdot\vec{r}} \; .$$

Etter innfangingen er det i en bundet tilstand ψ_s.
Vi antar at det ikke er noen fotoner til stede før reaksjonen. Etterpå har vi ett foton i en gitt mode $\vec{k}, \lambda$.
Overgangssannsynligheten pr. tid fra begynnelsestilstanden $|\Psi_b\rangle$, med elektronet i tilstanden ψ_b og ingen fotoner, til slutt-tilstanden $|\Psi_s\rangle$, med elektronet i tilstanden ψ_s og ett foton i moden $\vec{k}, \lambda$, er

$$w_{b\to s} = \frac{2\pi}{\hbar}\, |V_{sb}|^2\, \delta(E_s - E_b) \; ,$$

med

$$V_{sb} = \langle \Psi_s |\, H_1\, | \Psi_b \rangle \; .$$

Her er E_b og E_s de uperturberte energiene, dvs. at

$$H_0\, |\Psi_b\rangle = E_b\, |\Psi_b\rangle \; , \qquad H_0\, |\Psi_s\rangle = E_s\, |\Psi_s\rangle \; ,$$

og δ er Diracs deltafunksjon, mens H_1 er den delen av Hamilton-operatoren som beskriver vekselvirkningen mellom elektronet og det elektromagnetiske feltet,

$$H_1 = \frac{e}{m}\, \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{p} \; .$$

a) Hvorfor kan ikke elektronet fanges inn uten at det samtidig sendes ut minst ett foton? Hvorfor er det større sannsynlighet for at det sendes ut ett foton enn at det sendes ut to eller flere fotoner?

b) Vis at

$$V_{sb} = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck\mathcal{V}}} \int \mathrm{d}^3\vec{r}\, \psi_s(\vec{r})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\, (\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p})\, \psi_b(\vec{r}) \ .$$

c) Beregn det differensielle tverrsnittet $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ for innfanging, når fotonet sendes ut innenfor romvinkelelementet $\mathrm{d}\Omega$, og polarisasjonen ikke observeres. Anta at slutt-tilstanden for elektronet er grunntilstanden i Coulomb-potensialet $-Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$, altså

$$\psi_s(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\, \mathrm{e}^{-r/a} \ ,$$

der $a = a_0/Z$, og a_0 er Bohr-radien for hydrogen.
Kommenter kort hvordan tverrsnittet avhenger av diverse størrelser, som f.eks. retningen av fotonet, kjerneladningen Ze og impulsen til det innkommende elektronet, $p_b = \hbar k_b$.

Formler som kan vise seg nyttige:
I grensen $\mathcal{V} \to \infty$ kan en sum over bølgetall omgjøres til et integral, i følge formelen

$$\sum_{\vec{k}} \ \to \ \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3\vec{k} \ .$$

For en vilkårlig vektor $\vec{K}$ er

$$\sum_{\lambda=1}^{2} (\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{K})^2 = \vec{K}^2 - \left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{K}}{k} \right)^2 \ .$$

For $\mathrm{Re}\,\lambda > 0$ er

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^n\, \mathrm{e}^{-\lambda r} = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \ .$$