NTNU **Institutt for fysikk**

Faglig kontakt under eksamen:
Stein Olav Skrøvseth
Telefon: 96045

Eksamen i SIF4047 Anvendt kvantemekanikk

Tirsdag 13.mai 2003
09:00–15:00

Tillatte hjelpemidler: Alternativ C
- Standard kalkulator.
- K. Rottman: *Matematisk formelsamling*
- Øgrim og Lian: *Størrelser og enheter i fysikk og teknikk*

Til slutt i oppgaveheftet er det gitt noen opplysninger som kandidaten kan få bruk for. Det er opp til kandidaten selv å tolke disse.

Sensuren faller innen 3. juni 2003.
Sensuren legges ut på fagets hjemmeside så snart den er klar.

Dette oppgavesettet er på 4 sider, pluss et vedlegg på en side.

Oppgave 1.

a) Forklar kort prinsippene for Hartree– og Hartree-Fock-metodene og forskjellen(e) mellom de to teknikkene.

b) Se på et system med to partikler med impulser $\boldsymbol{p}_1$ og $\boldsymbol{p}_2$ og posisjoner $\boldsymbol{r}_1$ og $\boldsymbol{r}_2$. La Hamiltonfunksjonen for systemet være

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}_1) + V(\boldsymbol{r}_2) + W(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2),$$

med symmetrisk vekselvirkning mellom partiklene, altså

$$W(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = W(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1).$$

Anta at bølgefunksjonen er gitt ved

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2).$$

Vis ved en Hartree(-Fock)-fremgangsmåte at dette problemet kan omformuleres til et enpartikkelproblem på formen

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + f(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}) = \lambda\psi(\boldsymbol{r}),$$

og finn et uttrykk for funksjonen $f(\boldsymbol{r})$.

Oppgave 2.
Diracligningen er gitt ved

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = H\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

der Hamiltonoperatoren er

$$H = c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2.$$

a) Matrisene $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ og β er kvadratiske $N \times N$-matriser. Vis følgende egenskaper ved disse fire matrisene:

i) Alle matrisene må være hermitiske.

ii) N må være like.

iii) $\mathrm{Trace}(\alpha_i) = \mathrm{Trace}(\beta) = 0$.

b) I et ytre magnetfelt $\boldsymbol{\mathcal{B}} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ blir Hamiltonoperatoren

$$H = c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi} + \beta mc^2,$$

der $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A}$. Anta at Hamiltonoperatoren kan skrives som $H = H_0 + mc^2$, og anta at vi er i ikke-relativistisk grense; altså at $H_0 \ll mc^2$. Vis ved å kvadrere Hamiltonoperatoren at

$$H_0 \simeq \frac{1}{2m}\alpha_i\alpha_j\pi_i\pi_j,$$

med summasjon av gjentatte indekser over $1\ldots 3$.

c) Vis så, ved å bruke at spinnoperatoren i Dirac-teori er

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2i}\left(\alpha_2\alpha_3, \alpha_3\alpha_1, \alpha_1\alpha_2\right),$$

at vi kan skrive

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} - \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}},$$

og bestem elektronets magnetiske moment $\boldsymbol{\mu}$.

Tips: Du kan ha nytte av den oppgitte vektorrelasjonen i vedlegget.

Oppgave 3.
I kvantisert strålingsteori er det elektromagnetiske vektorpotensialet gitt ved

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1}^{2} \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}} \left(a_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \right) \tag{1}$$

i et endelig normeringsvolum $\mathcal{V}$ med periodiske grensebetingelser. Operatorene $a_{\boldsymbol{k},\lambda}$ og $a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}$ har en tidsavhengighet som er gitt av $a_{\boldsymbol{k},\lambda}(t) = a_{\boldsymbol{k},\lambda}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}t}$. De elektriske og magnetiske feltene er gitt ved

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \quad \text{og} \quad \boldsymbol{\mathcal{B}}(\boldsymbol{r},t) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t).$$

a) Regn ut eksplisitte uttrykk for $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)$ og $\boldsymbol{\mathcal{B}}(\boldsymbol{r},t)$. Vis kommutatorrelasjonen

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{p}\right] = -\hbar\boldsymbol{k}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}.$$

b) Forklar den fysiske betydningen av størrelsene $\boldsymbol{k}$, $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}$, $a_{\boldsymbol{k},\lambda}$ og $a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}$. Hvilke betingelser legger det på størrelsene som inngår i definisjonen (1) at vi opererer i såkalt *Coulomb-gauge*, altså der $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$?

I førsteordens tidsavhengig pertubasjonsteori er sannsynligheten for at en overgang fra en tilstand $|i\rangle$ til en annen tilstand $|f\rangle$ skal skje lik

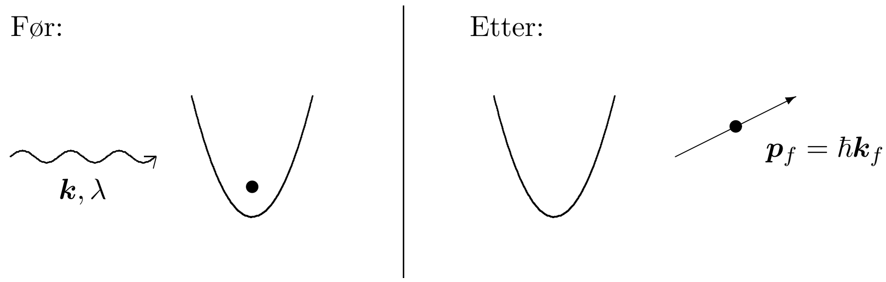
$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f|\hat{V}|i\rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f).$$

Her er $\hat{V}$ pertubasjonspotensialet, altså $H = H_0 + \hat{V}$, og E_i og E_f er energien i henholdsvis start- og slutt-tilstand.
Betrakt feltet som en pertubasjon i Hamiltonfunksjonen, altså sett

$$H = H_0 + \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2.$$

Se på et elektron som er bundet i et komplekst atom. Anta at potensialet dette elektronet er bundet i kan tilnærmes ved et tredimensjonalt, isotropt harmonisk oscillator-potensial med frekvens ω_0 så lenge elektronet er i eller i umiddelbar nærhet av atomet. Anta at elektronet i utgangspunktet er i gunntilstanden til dette potensialet. La et polarisert foton med bølgetall $\boldsymbol{k}$ og polarisasjonsretning $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}$ slå løs elektronet, mens fotonet blir fullstendig absorbert i prosessen (se figur). Anta at elektronet blir fullstendig løsrevet fra atomet, altså at det beskrives ved planbølgen

$$\psi_f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_0}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}}.$$



c) Skriv ned tilstandene og de tilhørende energiene for start- og slutt-tilstandene i denne prosessen, og bestem hvilke ledd i Hamiltonfunksjonen som har betydning for prosessen. Begrunn svarene kort.

d) Vis at

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = \frac{2e\hbar^{9/4}\pi^{3/4}}{m^{7/4}\omega_0^{3/4}\sqrt{\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}\mathcal{V}\mathcal{V}_0}}\,(\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\boldsymbol{k}_f)\exp\left(-\frac{\hbar}{2m\omega_0}q^2\right),$$

hvor $\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_f$.

e) Regn ut spredningstverrsnittet $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ for prosessen. Drøft svaret med tanke på hvilke retninger det er mest sannsynlig at elektronet spres i forhold til det innkommende fotonet.

Nyttige formler og relasjoner

Harmonisk oscillator:

Isotrop tredimensjonal harmonisk oscillator:

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \boldsymbol{r}^2$$

Egenfunksjoner: $\Psi(\boldsymbol{r}) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$, der

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Energiegenverdier:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right); \qquad n_x, n_y, n_z \in \{0, 1, 2, \ldots\}.$$

Kommutatorrelasjoner:

- Kanonisk kommuteringsregel: $[x, p_x] = \mathrm{i}\hbar$.
- For det tilfellet at $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$, gjelder kommutatorrelasjonen

$$[A^n, B] = n\,[A,B]\,A^{n-1}.$$

Diracligningen:

For matrisene $\boldsymbol{\alpha}$ og β som inngår i Dirac-ligningen gjelder følgende generelt:

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1 \qquad \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0 \text{ når } (i \neq j)$$
$$\text{og} \quad \beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0.$$

Standardrepresentasjonen:

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

Paulimatrisene:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vektorrelasjon:

For en vilkårlig vektor $\boldsymbol{v}$ og skalar φ gjelder

$$\nabla \times (\boldsymbol{v}\varphi) = \varphi(\nabla \times \boldsymbol{v}) - \boldsymbol{v} \times \nabla\varphi.$$

Integraler:

$$\int_0^\infty x\,\mathrm{e}^{-p^2x^2}\sin(ax)\,\mathrm{d}x = \frac{a\sqrt{\pi}}{4p^3}\exp\left(-\frac{a^2}{4p^2}\right)$$

I grensen $\mathcal{V} \to \infty$ kan en sum over bølgetall gjøres om til et integral i henhold til

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

I kulekoordinater er $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi$.