NTNU

Institutt for fysikk

Fakultet for naturvitenskap og teknologi

Løsningsforslag til eksamen i SIF4047 Anvendt kvantemekanikk

Tirsdag 13. mai 2003

Oppgavesettet gitt av Stein Olav Skrøvseth.

Dette løsningsforslaget er på 9 sider.

Oppgave 1.

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

Hartree– og Hartree-Fock-metodene er teknikker for å finne grunntilstanden i et mangepartikkelsystem. Begge metodene er basert på variasjonsregning, og taktikken er å minimere $\langle H \rangle$ under forutsetning at bølgefunksjonen er normert og gitte antakelser om bølgefunksjonen. For Hartree-metoden antar man at bølgefunksjon er en ren produktbølgefunksjon;

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) = \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\cdots\psi_N(\boldsymbol{r}_N),$$

mens man i Hartree-Fock-metoden antar at bølgefunksjonen er gitt som en Slaterdeterminant.

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 $f(\boldsymbol{r})$.

Først må man finne et uttrykk for $\langle H \rangle$;

$$\langle H \rangle = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\, \psi^*(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}')H\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')$$

Man kan bruke at første og andre så vel som tredje og fjerde ledd i H gir nøyaktig samme integraler, slik at en kan skrive

$$\langle H\rangle = 2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) + \iint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,\psi^*(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}').$$

Nå må man definere funksjonalen

$$F[\psi,\psi^*] = \langle H\rangle - \Lambda\left(\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,|\psi(\boldsymbol{r})|^2 - 1\right),$$

som man skal ekstremalisere, altså ved å finne variasjonen

$$\begin{aligned}\delta F &\equiv F[\psi,\psi^*+\delta\psi^*] - F[\psi,\psi^*]\\ &= 2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})\\ &\quad+\iint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')\\ &\quad+\iint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,\psi^*(\boldsymbol{r})\delta\psi^*(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')\\ &\quad-\Lambda\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

Nå får vi bruk for antakelsen om at vekselvirkningen er symmetrisk, for ved å bytte navn på de to integrasjonsvariablene i 3. integral vil dette bli likt det 2. integralet. Dermed blir

$$\begin{aligned}\delta F &= 2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})\\ &\quad+2\iint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') - \Lambda\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\delta\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\\ &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\underbrace{\left\{2\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) + 2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\psi^*(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') - \Lambda\psi(\boldsymbol{r})\right\}}_{\delta F/\delta\psi^*}\delta\psi^*(\boldsymbol{r}),\end{aligned}$$

der den funksjonalderiverte er definert som vanlig. Ektremaliseringsbetingelsen er nå at $\frac{\delta F}{\delta\psi^*} = 0$, som gir

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})+\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|\psi(\boldsymbol{r}')|^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{\Lambda}{2}\psi(\boldsymbol{r}),$$

altså er utsagnet bevist med $\lambda = \Lambda/2$, og

$$\underline{\underline{f(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\,W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|\psi(\boldsymbol{r}')|^2.}}$$

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.
Hamiltonoperatoren må være hermitisk, derav følger resultatet direkte.

ii) N må være like.
Vi vet at $\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i$. Derfor må

$$\det(\alpha_i\beta) = \det(-\beta\alpha_i) = (-1)^N\det(\beta\alpha_i) = (-1)^N\det(\alpha_i\beta).$$

Derav følger at $(-1)^N = 1$, og altså må N være like.

iii) $\mathrm{Trace}(\alpha_i) = \mathrm{Trace}(\beta) = 0$.
Vi bruker at $\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i$, som gir, siden $\beta^2 = 1$ at $\alpha_i = -\beta\alpha_i\beta$. Videre vet vi at sporet av et produkt av matriser er syklisk, som gir

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

Derfor må $\mathrm{Trace}(\alpha_i) = 0$. Argumentet for å vise at $\mathrm{Trace}(\beta) = 0$ er helt tilsvarende.

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 $1\ldots 3$.

Kvadratet av Hamiltonoperatoren i Diracligninga gir

$$\begin{aligned}H^2 &= c^2(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi}) + \beta^2m^2c^4 + mc^3(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi}\beta + \beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})\\ &= c^2(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 + m^2c^4.\end{aligned}$$

Det siste uttrykket oppnår vi fordi $\beta^2 = 1$, og fordi β antikommuterer med alle α-matrisene, slik at de to delene av det siste leddet kansellerer hverandre. Videre er i følge antakelsen

$$H^2 = H_0^2 + 2H_0mc^2 + m^2c^4 = 2H_0mc^2 + m^2c^4 + \mathcal{O}(H_0^2),$$

og ved å sammenligne dette med det foregående uttrykket, ser vi at

$$2H_0mc^2 = c^2(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})^2,$$

eller

$$H_0 = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 = \frac{1}{2m}\alpha_i\alpha_j\pi_i\pi_j.$$

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

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

at vi kan skrive

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

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

Først skriver vi om resultatet fra forrige oppgave til

$$\begin{aligned} H_0 =& \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} + \frac{1}{2m}[\alpha_1\alpha_2(\pi_1\pi_2 - \pi_2\pi_1) + \alpha_3\alpha_1(\pi_3\pi_1 - \pi_1\pi_3) + \alpha_2\alpha_3(\pi_2\pi_3 - \pi_3\pi_2)] \\ =& \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} + \frac{1}{2m}\frac{2\mathrm{i}}{\hbar}\left[S_z(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi})_z + S_y(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi})_y + S_x(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi})_x\right] \\ =& \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} + \frac{\mathrm{i}}{m\hbar}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi}), \end{aligned}$$

hvor vi har brukt at $\alpha_i^2 = 1$ og antikommuteringen mellom α-matrisene. Nå trenger vi et uttrykk for $\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi}$. Vi vet umiddelbart at $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p} = \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A} = 0$, slik at

$$\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi} = (\boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A})\times(\boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A}) = q(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}q\hbar\left(\nabla\times\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\times\nabla\right).$$

Vektorrelasjonen i vedlegget gir nå at

$$\nabla\times\boldsymbol{A}\psi + \boldsymbol{A}\times\nabla\psi = (\nabla\times\boldsymbol{A})\psi - \boldsymbol{A}\times\nabla\psi + \boldsymbol{A}\times\nabla\psi = \boldsymbol{\mathcal{B}}\psi,$$

som betyr at $\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi} = -\mathrm{i}q\hbar\boldsymbol{\mathcal{B}}$, og dermed

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} + \frac{q}{m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}},$$

og elektronets magnetiske moment er

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\mu} = -\frac{q}{m}\boldsymbol{S}.}}$$

Oppgave 3.

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

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

Ved å bruke at $\frac{\partial}{\partial t}a_{\boldsymbol{k},\lambda} = -\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k},\lambda}$ og $\frac{\partial}{\partial t}a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} = \mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}$ finner vi

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}, t) &= -\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\frac{\partial}{\partial t}a_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \frac{\partial}{\partial t}a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) \\ &= \underline{\underline{\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\mathcal{V}\varepsilon_0}}\left(a_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right).}} \end{aligned}$$

Vektorrelasjonen vi brukte i forrige oppgave gir

$$\nabla \times \left(\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} (\nabla \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}) - \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \times \nabla \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \pm \mathrm{i}\left(\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\right) \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}},$$

slik at

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathcal{B}}(\boldsymbol{r},t) &= \nabla \times \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1}^{2} \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}} \left(a_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) \\ &= \underline{\underline{\mathrm{i} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1}^{2} (\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}) \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}} \left(a_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right)}}.\end{aligned}$$

Kommutatorrelasjonen kan finnes på to måter; den enkleste er å virke på en prøvefunksjon $\psi = \psi(\boldsymbol{r})$;

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{p}\right] \psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p}\psi - \boldsymbol{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p}\psi - (\psi\boldsymbol{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}\psi) = -(\boldsymbol{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}})\psi,$$

og videre er

$$-\boldsymbol{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{i}\hbar\nabla \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{i}\hbar(\mathrm{i}\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \underline{\underline{-\hbar\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}}.$$

Den andre måten er å bruke at $[x, p_x] = \mathrm{i}\hbar$ og så videre, og den oppgitte kommuteringsregelen; først skriv at

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{p}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^n, \boldsymbol{p}\right].$$

Nå vil $[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}]$ kommutere med $\boldsymbol{p}$, slik at vi kan bruke den oppgitte relasjonen:

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{p}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} n \left[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}\right] (\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^{n-1}$$

Nå finner vi

$$[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}] = \mathrm{i}\left([k_x x, \boldsymbol{p}] + [k_y y, \boldsymbol{p}] + [k_z z, \boldsymbol{p}]\right) = \mathrm{i}(k_x \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{e}}_x + k_y \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{e}}_y + k_z \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{e}}_z) = -\hbar\boldsymbol{k},$$

og dermed blir

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{p}\right] = -\hbar\boldsymbol{k} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^{n-1}}{(n-1)!} = -\hbar\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}.$$

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 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$?

- $\boldsymbol{k}$: Bølgens *bølgevektor*. Har samme retning som bølgens forplantningsretning, og størrelse $|\boldsymbol{k}| = \frac{2\pi}{\Lambda}$ når Λ er bølgelengden.
- $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}$: Bølgens *polarisasjonsretning.* λ her kan ta to verdier, 1 og 2, tilsvarende de to ortogonale polarisasjonsretningene. Størrelsene $(\boldsymbol{k}, \lambda)$ definerer tilsammen unikt det vi kaller en *mode.*

- $a_{\boldsymbol{k},\lambda}$: Destruksjonsoperatoren i moden $(\boldsymbol{k},\lambda)$. Virker man med denne operatoren på en fotontilstand, vil man få en ny tilstand med ett foton mindre i denne moden.
- $a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}$: Kreasjonsoperatoren i moden $(\boldsymbol{k},\lambda)$. Virker man med denne operatoren på en fotontilstand, vil man få en ny tilstand med ett foton mer i denne moden.

I Coulomb-gauge vil betingelsen $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ tilsvare, siden $\nabla \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{i}\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$,

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{A} &= \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \mathrm{i}\boldsymbol{k}a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right)\\ &= \mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}(\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\boldsymbol{k})\sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(a_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) = 0,\end{aligned}$$

som medfører at $\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}=0$ i alle moder. Altså at polarisasjonsvektoren står vinkelrett på forplantningsretningen.

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.

Start- og slutt-tilstandene kan vi skrive som

$$\begin{aligned}|i\rangle &= |\psi_i\rangle|\cdots,n_{\boldsymbol{k},\lambda},\cdots\rangle\\ |f\rangle &= |\psi_f\rangle|\cdots,n_{\boldsymbol{k},\lambda}-1,\cdots\rangle,\end{aligned}$$

hvor

$$\langle\boldsymbol{r}|\psi_i\rangle = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\boldsymbol{r}^2} \qquad \text{og} \qquad \langle\boldsymbol{r}|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_0}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}}.$$

Videre er start- og slutt-energiene gitt ved

$$E_i = \frac{3}{2}\hbar\omega_0 + \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \qquad \text{og} \qquad E_f = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_f^2}{2m}.$$

Her endres ett fotontall i prosessen, og derfor må vi ha lineær vekselvirkning i $\boldsymbol{A}$. Ergo er pertubasjonspotensialet gitt ved $\hat{V} = \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$.

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

Her er det (nesten) bare å sette igang å integrere. Det er opplagt at leddet som inneholder $a_{\boldsymbol{k},\lambda}$ er det som bidrar i summen over moder i $\boldsymbol{A}$. Derfra vil vi derfor få en faktor $\sqrt{n_{\boldsymbol{k},\lambda}}$, slik at vi har

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar n_{\boldsymbol{k},\lambda}}{2\mathcal{V}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}}}\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\langle\psi_f|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|\psi_i\rangle.$$

Nå vet vi at $\boldsymbol{p}|\psi_f\rangle = \hbar\boldsymbol{k}_f|\psi_f\rangle$ siden ψ_f er en planbølge. For å benytte oss av dette må vi flytte $\boldsymbol{p}$ forbi eksponensialfaktoren. Dette kan begrunnes på minst tre måter; For det første vet vi at siden vi har at $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$, så kan $\boldsymbol{p}$ flyttes på andre siden av $\boldsymbol{A}$ i utgangspunktet, og vi omgår problemet helt. For det andre kan vi bruke kommuteringsregelen fra a), slik at

$$\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p} | \psi_i \rangle = \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \langle \psi_f | (\boldsymbol{p} - \hbar \boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} | \psi_i \rangle = \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \langle \psi_f | \boldsymbol{p} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} | \psi_i \rangle,$$

idet vi vet at $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \boldsymbol{k} = 0$. For det tredje kan man også bruke en delvis integrasjon. Uansett er

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar n_{\boldsymbol{k},\lambda}}{2\mathcal{V}\varepsilon_0 \omega_{\boldsymbol{k}}}} (\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \hbar \boldsymbol{k}_f) \underbrace{\langle \psi_f | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} | \psi_i \rangle}_{\mathscr{M}}.$$

Vi må da regne ut matriseelementet $\mathscr{M}$:

$$\begin{aligned}
\mathscr{M} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\, \psi_f^*(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \psi_i(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\boldsymbol{r}^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\boldsymbol{r}^2},
\end{aligned}$$

der vi har definert impulsoverføringen $\hbar\boldsymbol{q}$. Hvis vi nå legger $\boldsymbol{q}$ langs positiv z-akse, blir $\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} = qr\cos\vartheta$;

$$\mathscr{M} = \frac{2\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\, r^2 \sin\vartheta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\vartheta} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2}$$

ϑ-integralet går nå greit:

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\, \sin\vartheta \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\vartheta} \overset{\eta=\cos\vartheta}{=} \int_{-1}^1 \mathrm{d}\eta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\eta} = \frac{2}{qr}\sin(qr)$$

Altså er

$$\begin{aligned}
\mathscr{M} &= \frac{4\pi}{q\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r \sin(qr) \mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2} \\
&= \frac{4\pi}{q\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \frac{q\sqrt{\pi}}{4\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar}\right)^{3/2}} \exp\left[-\frac{q^2}{4\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar}\right)}\right] = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{V}_0}} \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}\right)^{3/4} \mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{2m\omega_0}q^2}
\end{aligned}$$

ved hjelp av det oppgitte integralet. Innsatt gir dette

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

Dette er identisk med det vi skulle vise med unntak av faktoren $\sqrt{n_{\boldsymbol{k},\lambda}}$, som man greit kan sette til 1. Dette innebærer at det fotonet som faktisk slår ut elektronet er det eneste i den aktuelle moden. Som vi skal se, vil ikke denne faktoren uansett ha noe å si for spredningstverrsnittet (så lenge den ikke er null, selvsagt!).

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.

Først må vi finne $w_{i\to f}$:

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|\hat{V}|i\rangle\right|^2 \delta(E_i - E_f) = \frac{8e^2\hbar^{7/2}\pi^{5/2}n_{\boldsymbol{k},\lambda}}{m^{7/2}\omega_0^{3/2}\varepsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}\mathcal{V}\mathcal{V}_0}\,|\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\boldsymbol{k}_f|^2\,\mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{m\omega_0}q^2}\,\delta(E_i - E_f)$$

Spredningstverrsnittet finner vi ved å summere over størrelsen på $\boldsymbol{k}_f$, men ikke retningen, og dividere på innkommende strømtetthet,

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{j_{\text{inn}}}\sum_{|\boldsymbol{k}_f|} w_{i\to f} \simeq \frac{\mathcal{V}_0}{(2\pi)^3 j_{\text{inn}}}\int_0^\infty \mathrm{d}k_f\, k_f^2 w_{i\to f},$$

når vi lar normeringsvolumet $\mathcal{V}_0$ være tilstrekkelig stort. Strømtettheten er gitt ved

$$j_{\text{inn}} = \frac{n_{\boldsymbol{k},\lambda}}{\mathcal{V}}\,c.$$

Videre kan deltafunksjonen skrives om på følgende måte;

$$\begin{aligned}\delta(E_i - E_f) &= \delta\left(\frac{3}{2}\hbar\omega_0 + \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} - \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_f^2}{2m}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\,\delta\left(\frac{3m}{\hbar}\omega_0 + \frac{2m}{\hbar}\omega_{\boldsymbol{k}} - \boldsymbol{k}_f^2\right)\\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\,\delta\left(\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega} - \boldsymbol{k}_f^2\right),\end{aligned}$$

idet vi for enkelhets skyld har definert frekvensen $\bar{\omega} \equiv 3\omega_0 + 2\omega_{\boldsymbol{k}}$. Dette gir at

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2e^2\hbar^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,m^{5/2}\omega_0^{3/2}\varepsilon_0 c\omega_{\boldsymbol{k}}}\int_0^\infty \mathrm{d}k_f\, k_f^2\,|\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\boldsymbol{k}_f|^2\,\mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{m\omega_0}q^2}\,\delta\left(\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega} - \boldsymbol{k}_f^2\right).$$

For å kunne utnytte deltafunksjonen, må vi endre integrasjonsvariabel til $\eta = k_f^2 \Rightarrow \mathrm{d}\eta = 2k_f\,\mathrm{d}k_f$. Det er også mulig å gjøre dette ved å la

$$\delta\left(\frac{m}{\hbar}\bar{\omega} - k_f^2\right) = \delta\left[\left(\sqrt{\frac{m}{\hbar}\bar{\omega}} + k_f\right)\left(\sqrt{\frac{m}{\hbar}\bar{\omega}} - k_f\right)\right] = \frac{1}{\sqrt{\frac{m}{\hbar}\bar{\omega}} + k_f}\,\delta\left(\sqrt{\frac{m}{\hbar}\bar{\omega}} - k_f\right),$$

idet k_f alltid er positiv. Nå er det også nyttig å tenke seg litt om for valg av koordinatsystem. Et fornuftig valg er å la $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}$ peke langs positiv z-akse, og $\boldsymbol{k}$ langs positiv x-akse. Da vil

$$\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\boldsymbol{k}_f = k_f\cos\vartheta \qquad \text{og} \qquad q^2 = (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_f)^2 = k^2 + k_f^2 - 2kk_f\cos\varphi\sin\vartheta.$$

Dette valget er selvsagt ikke unikt, men så lenge man er forsiktig med spesifikasjon av vinkler, vil jo fysikken bli den samme. Nå blir integralet enkelt, og litt opprydding gir

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{e^2\hbar^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,m^{5/2}\omega_0^{3/2}\varepsilon_0 c\omega_{\boldsymbol{k}}}\int_0^\infty \mathrm{d}\eta\,\eta^{3/2}\cos^2\vartheta\,\mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left(k^2+\eta-2\sqrt{\eta}k\cos\varphi\sin\vartheta\right)}\,\delta\left(\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega} - \eta\right)\\ &= \frac{e^2\hbar^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,m^{5/2}\omega_0^{3/2}\varepsilon_0 c\omega_{\boldsymbol{k}}}\left(\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega}\right)^{3/2}\cos^2\vartheta\,\mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left(k^2+\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega}-2\sqrt{\frac{m}{\hbar}\,\bar{\omega}}\,k\cos\varphi\sin\vartheta\right)}\\ &= \underline{\underline{\frac{e^2}{\sqrt{\pi}\,m\varepsilon_0 c\omega_{\boldsymbol{k}}}\left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_0}\right)^{3/2}\cos^2\vartheta\,\exp\left[-\frac{\hbar k^2}{m\omega_0} - \frac{\bar{\omega}}{\omega_0} + 2\frac{k}{\omega_0}\sqrt{\frac{\hbar\bar{\omega}}{m}}\cos\varphi\sin\vartheta\right]}}.\end{aligned}$$

Det kan sies mye om dette spredningstverrsnittet, men oppgaven spør etter retningsavhengigheten i forhold til det innkommende fotonet. Denne er gitt av funksjonen $f(\vartheta, \varphi) \equiv \cos^2 \vartheta \exp(K \cos \varphi \sin \vartheta)$ der $K > 0$. Først ser vi at faktoren $\cos^2 \vartheta$ gjør at det er mest sannsynlig at elektronet kommer ut i fotonets polarisasjonsretning ($\vartheta = 0, \pi$), og aldri vinkelrett på denne ($\vartheta = \pi/2$). Dette er samme effekt som i den vanlige fotoelektriske effekten, nemlig at det er fotonets $\mathcal{E}$-felt som aksellererer elektronet. Eksponensialfaktoren gjør at det er mer sannsynlig at elektronet går med $\boldsymbol{k}$ ($|\varphi| < \pi/2$), enn motsatt ($|\varphi| > \pi/2$). Dette blir også sterkere desto større $K \propto |\boldsymbol{k}|$ er. Fotonets impuls overføres altså til dels til elektronet. Funksjonen f er skissert for forskjellige K i vedlegget. (Legg merke til skaleringen av z-aksen; $f(0, \varphi) = 1$ for alle φ.)

Selv om man ikke skulle komme helt i mål med spredningstverrsnittet er det likevel mulig å si mye om retningsavhengigheten ut fra det oppgitte uttrykket for $\langle f|\hat{V}|i\rangle$, da man vet at retningsavhengigheten til spredningstverrsnittet blir den samme som for $\left|\langle f|\hat{V}|i\rangle\right|^2$.