

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 $\mathbf{p}_1$ og $\mathbf{p}_2$ og posisjoner $\mathbf{r}_1$ og $\mathbf{r}_2$. La Hamiltonfunksjonen for systemet være

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

med symmetrisk vekselvirkning mellom partiklene, altså

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

Anta at bølgefunksjonen er gitt ved

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

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

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

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

Oppgave 2.

Diracligningen er gitt ved

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

der Hamiltonoperatoren er

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

- 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) $\text{Trace}(\alpha_i) = \text{Trace}(\beta) = 0$.

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

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

der $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + q\mathbf{A}$. 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 $1 \dots 3$.

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

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

at vi kan skrive

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

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

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

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

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

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

$$[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \mathbf{p}] = -\hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

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

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

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

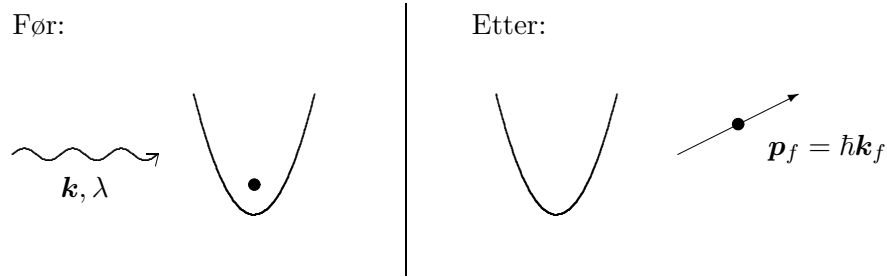
Her er $\hat{V}$ pertubasjonspotensialet, altså $H = H_0 + \hat{V}$, og E_i og E_f er energien i henholdsvis start- og slutt-tilstand.

Betrakt feltet som en pertubasjon i Hamiltonfunksjonen, altså sett

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

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 $\mathbf{k}$ og polarisasjonsretning $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda}$ 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

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



- 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

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

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

- e) Regn ut spredningstverrsnittet $d\sigma/d\Omega$ 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:

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

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

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

Energieigenverdier:

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

Kommutatorrelasjoner:

- Kanonisk kommuteringsregel: $[x, p_x] = i\hbar$.
- 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 α og β som inngår i Dirac-ligningen gjelder følgende generelt:

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

$$\text{og } \beta \alpha_i + \alpha_i \beta = 0.$$

Standardrepresentasjonen:

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

Paulimatrissene:

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

Vektorrelasjon:

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

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

Integraler:

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

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

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}.$$

I kulekoordinater er $d^3\mathbf{r} = r^2 \sin\vartheta dr d\vartheta d\varphi$.