

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPLIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Øyvind Borck
Telefon: 73551091 (mobil: 40859107)

Eksamen TFY4210: Anvendt kvantemekanikk

Onsdag 23. mai 2007
kl. 09.00–13.00
Bokmål

Oppgavesettet består av tre oppgaver på fire sider, pluss et vedlegg på en side.

Tillatte hjelpemidler: C.

K. Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim og Lian: Størrelser og enheter i fysikken
Typegodkjent kalkulator med tomt minne, i henhold til liste utarbeidet
av NTNU
Se også oppgitte formler på side 5 i oppgavesettet.

Alle delspørsmål teller likt.

Oppgavene er utarbeidet av Øyvind Borck og Ola Hunderi.

Oppgave 1

Hohenberg og Kohn har vist at å beregne grunntilstanden for et mangepartikkel-system er det samme som å finne den elektrontettheten $n(\mathbf{r})$ som minimaliserer energifunksjonen

$$E[n] = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) v_{\text{ekst}}(\mathbf{r}) + F[n]$$

hvor $v_{\text{ekst}}(\mathbf{r})$ er et eksternt potensial.

a) $F[n]$ er en *universell* funksjonal av elektrontettheten. Hva innebærer det?

Du skal nå, med Hohenberg-Kohn-funksjonen som utgangspunkt, finne en tilnærmet løsning for grunntilstanden til et atom. Det eksterne potensialet $v_{\text{ekst}}(\mathbf{r})$ er da Coulomb-potensialet:

$$v_{\text{ekst}}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Funksjonale $F[n]$ må approksimeres. Vi skal bruke Thomas-Fermi–approksimasjonen, det vil si:

$$F[n] = T_{\text{TF}}[n] + E_{\text{H}}[n]$$

der

$$T_{\text{TF}}[n] = A_{\text{s}} \int d\mathbf{r} n^{5/3}(\mathbf{r}) ,$$

med $A_{\text{s}} = \frac{3}{10m_e} \hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}$ er Thomas-Fermi approksimasjonen til den kinetiske energien, og

$$E_{\text{H}}[n] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2 n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

er Hartree-energien. Vi skal anta følgende form for elektrontettheten:

$$n(r) = C e^{-r/R} ,$$

der C er en normaliseringskonstant og R er en variasjonsparameter.

b) Bestem C ved å normalisere elektrontettheten slik at det totale antall elektroner for atomet er lik N .

c) Vis at:

$$E_{\text{ekst}}(R) \equiv \int d\mathbf{r} v_{\text{ekst}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) = -C_1 \frac{NZ}{R}$$

$$T_{\text{TF}}(R) = C_2 \frac{N^{5/3}}{R^2}$$

$$E_{\text{H}}(R) = \frac{5}{32} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{N^2}{R}$$

og bestem koeffisientene C_1 og C_2 .

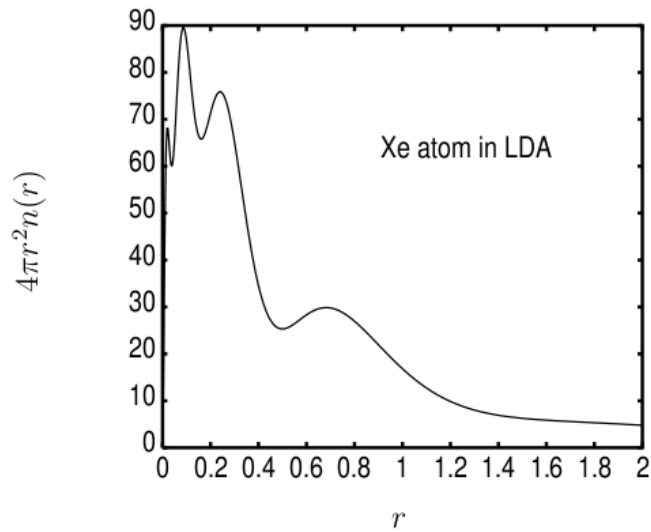
d) Finn en approksimasjon for grunntilstandsenergien E_{GS} og grunntilstandselektrontettheten $n_{\text{GS}}(r)$ som funksjoner av N og Z .

e) Vis at for et nøytralt atom, så er

$$E_{\text{GS}}(Z) = -C_3 Z^{7/3}$$

og bestem koeffisienten C_3 .

Thomas-Fermi–modellen for et atom kan løses eksakt, og man finner da at $C_3 = 1, 53749024 \text{ Ry}$.



- f) Sammenlign med din verdi, og kommenter.
- g) Figuren over viser et plot av elektrontettheten for xenon. Sammenlign med din elektrontetthet og kommenter.
- h) Approksimasjonen vi har valgt for $F[n]$ er nokså grov. Hvilke effekter har vi utelatt?

Oppgave 2

- a) Tenk tilbake på hvordan Dirac utledet sin relativistiske ligning for elektroner, gå fram på samme måte og utled en relativistisk likning for en *masseløs* ($m = 0$) spinn- $\frac{1}{2}$ -partikkel. Spesifiser betingelsene eventuelle matriser i likningen din må tilfredstille.
- b) Vis at man i dette tilfellet kan benytte de to Weyl-likningene:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \pm c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \Psi$$

hvor Ψ er en tokomponents bølgefunksjon, og $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, hvor σ_i ($i = x, y, z$) er Pauli-matrisene. Hvorfor kan man ikke bruke Pauli-matrisene når $m \neq 0$?

- c) Vis ved å anta en planbølgeløsning at $E = \pm pc$.

Oppgave 3

I kvantisert strålingsteori kan det elektromagnetiske vektorpotensialet skrives

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right)$$

når vi velger å bruke Coulombjustering ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) og lar feltet være begrenset til en boks med volum V og med periodiske grensebetingelser.

- a) Hva er $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$, $a_{\mathbf{k}, \lambda}$, og $a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$ i dette uttrykket? Hvilke betingelser medfører Coulombjusteringen for $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$ og $\mathbf{k}$?

Sannsynligheten for en overgang fra en tilstand $|i\rangle$ til en tilstand $|f\rangle$ er i førsteordens tidsavhengig perturbasjonsteori gitt ved den gyldne regel

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E_f)$$

Her er $\rho(E_f)$ tettheten av slutt-tilstander og M matriseelementet $\langle f | V | i \rangle$, hvor V er perturbasjonsdelen av Hamiltonoperatoren. Perturbasjonen V er

$$V = \frac{e}{2m} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2$$

(Vi ser bort fra spinn.)

- b) Vis at dersom vi velger Coulombjustering, så er

$$V = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2$$

- c) Tenk deg at du skal beregne levetiden for spontan emisjon fra $4p$ til $1s$ -tilstanden til atomært hydrogen. Hvilke(t) ledd vil bidra til matriseelementet M til laveste orden? Begrunn.
- d) Hvilke andre overganger er tillatt ved deeksitasjon fra $4p$ -tilstanden i den elektriske dipolapproximasjonen?

Oppgitt

Noen fundamentale konstanter og omregningsfaktorer

$$\hbar = 1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$e = 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$c = 2,99792 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$\varepsilon_0 = 8,85419 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$$

$$m_e = 9,10953 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$1 \text{ Ry} = 13,60570 \text{ eV}$$

$$1 \text{ eV} = 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Gammafunksjonen

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t} \quad s > 0$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(1) = 1 \quad \Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$$

En nyttig utvikling

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r'} \sum_{l,m} \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) \left(\frac{r}{r'} \right)^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta', \phi')$$

når $r > r'$, og med r og r' byttet om når $r < r'$. De sfæriske harmoniske funksjonene $Y_{lm}(\theta, \phi)$ er ortonormerte

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

og jeg minner om at

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Paulimatrissene

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

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPLIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Øyvind Borck
Telefon: 73551091 (mobil: 40859107)

Final exam TFY4210: Applied Quantum Mechanics

Wednesday May 23, 2007
Duration: 09.00–13.00
English

The exam consists of three problems on 5 pages, including one page containing fundamental constants and formulas.

Allowed help: C.

K. Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim og Lian: Størrelser og enheter i fysikken
Calculator approved by NTNU, with empty memory.
See also formulas on page 5.

All questions have equal weight.
Problems by: Øyvind Borck and Ola Hunderi.

Problem 1

Hohenberg and Kohn has shown that to find the ground state of a many-particle system is equivalent to finding the electron density $n(\mathbf{r})$ that minimises the energy functional

$$E[n] = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + F[n]$$

where $v_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ is an external potential.

a) $F[n]$ is a *universal* functional of the electron density. What does that mean?

You shall now, with the Hohenberg-Kohn functional as a starting point, find an approximation for the ground state energy and electron density of an atom. The external potential $v_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ is the Coulomb potential:

$$v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

The functional $F[n]$ must be approximated. We shall use the Thomas-Fermi approximation, that is:

$$F[n] = T_{\text{TF}}[n] + E_{\text{H}}[n]$$

where

$$T_{\text{TF}}[n] = A_{\text{s}} \int d\mathbf{r} n^{5/3}(\mathbf{r}) ,$$

with $A_{\text{s}} = \frac{3}{10m_e} \hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}$ is the Thomas-Fermi approximation to the kinetic energy, and

$$E_{\text{H}}[n] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2 n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

is the Hartree energy. We shall approximate the electron density by:

$$n(r) = C e^{-r/R} ,$$

where C is a constant and R is a variational parameter.

- b) Fix the constant C by normalising the electron density such that the total number of electrons for the atom is N .
- c) Show that:

$$E_{\text{ext}}(R) \equiv \int d\mathbf{r} v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) = -C_1 \frac{NZ}{R}$$

$$T_{\text{TF}}(R) = C_2 \frac{N^{5/3}}{R^2}$$

$$E_{\text{H}}(R) = \frac{5}{32} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{N^2}{R}$$

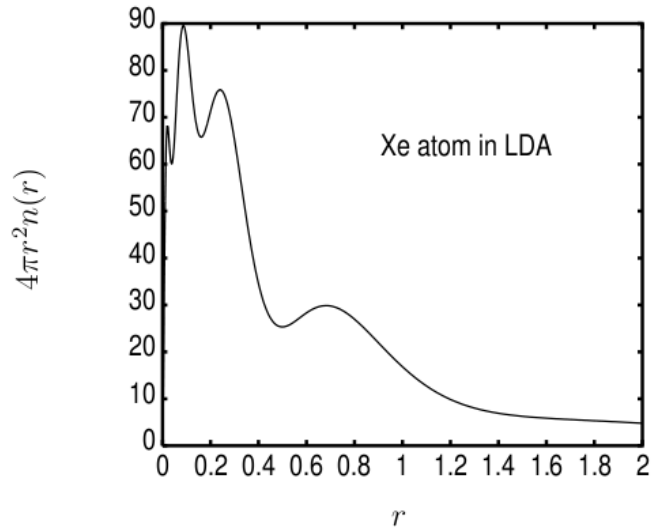
and fix the coefficients C_1 and C_2 .

- d) Find an approximation for the ground state energy E_{GS} and the ground state electron density $n_{\text{GS}}(r)$ as functions of N and Z .
- e) Show that in the case of a neutral atom

$$E_{\text{GS}}(Z) = -C_3 Z^{7/3}$$

and find a value the coefficient C_3 .

The Thomas-Fermi model for an atom can be solved exactly, and one then finds that $C_3 = 1.53749024 \text{ Ry}$.



- f) Compare with your value, and comment.
- g) The figure shows a plot of the electron density for Xenon. Compare with your electron density and comment.
- h) The approximation we have chosen for $F[n]$ is rather crude. Which effects have been neglected?

Problem 2

- a) Recall Dirac's reasoning for his relativistic equation for electrons, and proceed in similar fashion to deduce a relativistic equation for a *massless* ($m = 0$) spin- $\frac{1}{2}$ particle. Specify clearly the conditions on any of the matrices occurring in your equation.
- b) Show that in this case it is possible to use the two Weyl equations:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \pm c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \Psi$$

where Ψ is a twocomponent wave-function, and $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, where σ_i ($i = x, y, z$) are the Pauli matrices. Why is it not possible to use the Pauli matrices when $m \neq 0$?

- c) Use a plane-wave solution to show that $E = \pm pc$.

Problem 3

In quantized radiation theory, the electromagnetic vector potential can be written

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right)$$

when we choose the Coulomb gauge ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), and when the field is contained within an enclosure of volume V with periodic boundary conditions.

- a) What are $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$, $a_{\mathbf{k}, \lambda}$, og $a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$ in this expression? Which conditions does the Coulomb gauge imply for $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$ and $\mathbf{k}$?

The probability for a transition from state $|i\rangle$ to state $|f\rangle$ is in first order time-independent perturbation theory given by the Golden rule

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E_f)$$

Here, $\rho(E_f)$ is the density of final states and M the matrix element $\langle f|V|i\rangle$, where V is the perturbation part of the Hamiltonian. The perturbation V is

$$V = \frac{e}{2m} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2$$

(We neglect spin.)

- b) Show that in the Coulomb gauge

$$V = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2$$

- c) Imagine that you are given the task to calculate the life-time of spontaneous emission from the $4p$ to the $1s$ state of atomic hydrogen. Which term(s) in V will contribute to the matrix element M to lowest order? State the reasons for your choice.
- d) Which are the other allowed transitions within the electric dipole approximation when a hydrogen atom is de-excited from the $4p$ -state?

Some formulas and fundamental constants

Fundamental constants and conversion factors

$$\hbar = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$e = 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$c = 2.99792 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$\varepsilon_0 = 8.85419 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$$

$$m_e = 9.10953 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$1 \text{ Ry} = 13.60570 \text{ eV}$$

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

The gamma function

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t} \quad s > 0$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(1) = 1 \quad \Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$$

A useful expansion

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r'} \sum_{l,m} \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) \left(\frac{r}{r'} \right)^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta', \phi')$$

when $r > r'$, and with r and r' interchanged when $r < r'$. The spherical harmonics $Y_{lm}(\theta, \phi)$ are orthonormal

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

and I remind you that

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

The Pauli matrices

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