



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 teknikene.

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;

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

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

- b) Se på et system med to partikler med impulser $\mathbf{p}_1$ 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 $f(\mathbf{r})$.

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

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

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

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

Nå må man definere funksjonale

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

som man skal ekstremalisere, altså ved å finne variasjonen

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

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

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

- 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 $1 \dots 3$.

Kvadratet av Hamiltonoperatoren i Diracligninga gir

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

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

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

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

$$2H_0 mc^2 = c^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi})^2,$$

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

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

at vi kan skrive

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

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

Først skriver vi om resultatet fra forrige oppgave til

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

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 $\mathbf{p} \times \mathbf{p} = \mathbf{A} \times \mathbf{A} = 0$, slik at

$$\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = (\mathbf{p} + q\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} + q\mathbf{A}) = q(\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}) = -iq\hbar(\nabla \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \nabla).$$

Vektorrelasjonen i vedlegget gir nå at

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

som betyr at $\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = -iq\hbar\mathbf{B}$, og dermed

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

og elektronets magnetiske moment er

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

Oppgave 3.

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

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

Ved å bruke at $\frac{\partial}{\partial t} a_{\mathbf{k}, \lambda} = -i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \lambda}$ og $\frac{\partial}{\partial t} a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger = i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$ finner vi

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

Vektorrelasjonen vi brukte i forrige oppgave gir

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

slik at

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

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

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

og videre er

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

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

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

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

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

Nå finner vi

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

og dermed blir

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

- 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 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$?

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

- $a_{\mathbf{k},\lambda}$: Destruksjonsoperatoren i moden $(\mathbf{k}, \lambda)$. Virker man med denne operatoren på en fotontilstand, vil man få en ny tilstand med ett foton mindre i denne moden.
- $a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$: Kreasjonsoperatoren i moden $(\mathbf{k}, \lambda)$. 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 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ tilsvare, siden $\nabla e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$,

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

som medfører at $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda} = 0$ 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

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

hvor

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

Videre er start- og slutt-energiene gitt ved

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

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

- d) Vis at

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

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

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

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

Nå vet vi at $\mathbf{p}|\psi_f\rangle = \hbar\mathbf{k}_f|\psi_f\rangle$ siden ψ_f er en planbølge. For å benytte oss av dette må vi flytte $\mathbf{p}$ forbi eksponensialfaktoren. Dette kan begrunnes på minst tre måter; For det

første vet vi at siden vi har at $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, så kan $\mathbf{p}$ flyttes på andre siden av $\mathbf{A}$ i utgangspunktet, og vi omgår problemet helt. For det andre kan vi bruke kommuteringsregelen fra a), slik at

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

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

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

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

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

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

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

ϑ -integralet går nå greit:

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{iqr \cos \vartheta} \stackrel{\eta = \cos \vartheta}{=} \int_{-1}^1 d\eta e^{iqr\eta} = \frac{2}{qr} \sin(qr)$$

Altså er

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

ved hjelp av det oppgitte integralet. Innsatt gir dette

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

Dette er identisk med det vi skulle vise med unntak av faktoren $\sqrt{n_{\mathbf{k},\lambda}}$, 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 $d\sigma/d\Omega$ for prosessen. Drøft svaret med tanke på hvilke retninger det er mest sannsynlig at elektronet spres i forhold til det innkommende fotonet.

Først må vi finne $w_{i \rightarrow f}$:

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

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

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

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

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

Videre kan deltafunksjonen skrives om på følgende måte;

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

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

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

For å kunne utnytte deltafunksjonen, må vi endre integrasjonsvariabel til $\eta = k_f^2 \Rightarrow d\eta = 2k_f dk_f$. 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 $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda}$ peke langs positiv z -akse, og $\mathbf{k}$ langs positiv x -akse. Da vil

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

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

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

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 $\mathbf{k}$ ($|\varphi| < \pi/2$), enn motsatt ($|\varphi| > \pi/2$). Dette blir også sterkere desto større $K \propto |\mathbf{k}|$ 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 $\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2$.