UNIVERSITETET I TRONDHEIM
NORGES TEKNISKE HØGSKOLE
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
P. C. Hemmer
Tel. 3648

EKSAMEN I FAG 74305 KVANTEMEKANIKK 2
Mandag 10. januar 1993
kl. 0900-1400

Tillatte hjelpemidler: Rottmann: Mathematische Formelsammlung
Barnett and Cronin: Mathematical Formulae
Godkjent kalkulator

Endel uttrykk, formler og konstanter er gitt i eget vedlegg.

Oppgave 1

a) Forklar med noen få setninger hva Born-Oppenheimer-metoden for molekylberegninger går ut på.

b) En lett partikkel 1 (masse m_1) og en tyngre partikkel 2 (masse m_2) tiltrekker hverandre med en harmonisk kraft. Partiklene befinner seg på hver sin side av grenseflata $z = 0$, slik at partikkel 1 bare kan være i halvrommet $z < 0$ og partikkel 2 bare kan være i halvrommet $z > 0$.

Hamiltonoperatoren for systemet er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}m_1\omega^2\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + V_0\left[\Theta(-z_1) + \Theta(z_2)\right],$$

der $V_0 \to \infty$. Her er $\Theta(x)$ en Heaviside-funksjon: $\Theta(x) = 1$ for $x > 1$, $\Theta(x) = 0$ for $x \leq 0$.

Schrödingerlikningen for systemet kan separeres, og grunntilstands-energien E_0^{tot} kan uttrykkes som

$$E_0^{tot} = \hbar\omega\sqrt{\tfrac{m_2}{m_1+m_2}} + \epsilon_0,$$

der ϵ_0 er laveste egenverdi av likningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2}{dz_1^2} - \frac{\hbar^{"}}{2m_2}\frac{d^2}{dz_2^2} + \frac{1}{2}m_1\omega^2(z_1 - z_2)^2\right]\psi(z_1, z_2) = \epsilon\psi(z_1, z_2),$$

med randkravet $\psi(z_1, z_2) = 0$ for $z_1 > 0$, og også for $z_2 < 0$.

Vis det.

c) Dersom en antar at partikkel 2 er uendelig tung og sitter rolig på grenseflata $z = 0$, hva er isåfall energibidraget ϵ_0?

d) Anta så at m_2 er endelig, men mye større enn m_1, og bruk Born-Oppenheimer-metoden til å finne den dominerende energikorreksjonen til resultatet under punkt c).

Oppgave 2

a) I ikke-relativistisk strålingsteori forårsakes overganger mellom tilstander i atomære systemer ved ledd i Hamiltonoperatoren som inneholder vekselvirkning mellom ladede partikler og strålingsfeltet. Hvilke typer vekselvirkningsledd kan forekomme? Forklar kort hvorledes disse framkommer.

b) For et elektron i en eksitert atomær tilstand $|i\rangle$ (energi E_i) vil det dominerende vekselvirkningsleddet i Hamiltonoperatoren i første ordens tidsavhengig perturbasjonsteori gi en spontan overgangssannsynlighet pr. tidsenhet til en annen atomær tilstand $|f\rangle$ (energi $E_f < E_i$), med det emitterte foton i romvinkelintervallet $d\Omega$ og med polarisasjon $\vec{e}_{\vec{k}\lambda}$, lik

$$d\Gamma_{i\to f} = d\Omega\frac{\alpha\omega_{if}}{2\pi m^2c^2}\left|\vec{e}_{\vec{k}\lambda}\cdot\langle f|\vec{p}|i\rangle\right|^2,$$

når elektrisk-dipol-tilnærmelsen gjøres. Her er $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ finstrukturkonstanten, $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$, og $\vec{k}$ er fotonets bølgevektor. Hva består elektrisk-dipol-tilnærmelsen i (regneteknisk og fysisk)?

Bevis kommutator-identiteten

$$[H, \vec{r}_n] = \frac{\hbar}{im}\vec{p}_n$$

når H er en Hamiltonoperator av formen

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ...)$$

Benytt identiteten til å vise at

$$\langle f|\vec{p}|i\rangle = im\omega_{fi}\langle f|\vec{r}|i\rangle.$$

c) Vis at den spontane overgangssannsynligheten pr. tidsenhet (uansett fotonets tilstand) kan skrives

$$w_{i\to f}^{sp} = \frac{4\alpha\omega_{if}^3}{3c^2}\,|\langle f|\vec{r}|i\rangle|^2.$$

d) Et elektron befinner seg i harmonisk oscillator-potensialet

$$V(\vec{r}) = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left(0.09(x^2+y^2)+z^2\right)$$

der m er elektronmassen. Energiegentilstandene $|n_x, n_y, n_z\rangle$ i potensialet er produkter aav energiegentilstandene $|n_x\rangle$, $|n_y\rangle$ og $|n_z\rangle$ for de tre kartesiske bidragene til Hamiltonoperatoren, og energiegenverdiene er

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega\left[0.3(n_x+n_y+1)+n_z+\tfrac{1}{2}\right],$$

der n_x, n_y og n_z er ikke-negative heltall. Elektronet er eksitert til tilstanden $|0,0,1\rangle$. Beregn spontan overgangssannsynlighet for alle tillatte overganger fra denne tilstanden. Finn et uttrykk for levetida τ_{001} for tilstanden $|0,0,1\rangle$.

e) Hvilke krav må ω oppfylle for at elektrisk-dipol-tilnærmelsen skal være en god approksimasjon?

Oppgave 3

La $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ være banedreieimpuls-operatoren, og $\vec{S} = (\hbar/im)(\alpha_2\alpha_3, \alpha_3\alpha_2, \alpha_1\alpha_2)$ spinnoperatoren for en Dirac-partikkel, og sett $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

a) Vis at banedreieimpulsen i sin alminnelighet ikke er en bevegelseskonstant for en fri Dirac-partikkel.

b) Svarer noen av følgende operatorer: $\vec{L}^2$, L_z, $\vec{S}^2$, S_z, $\vec{J}^2$, J_z (og i tilfelle hvilke) alltid til en bevegelseskonstant for

(1) en Dirac-partikkel ?
(2) en fri Dirac-partikkel?

(Svarene trenger ikke begrunnes).

Oppgave 4

Vedlegg: Formler, uttrykk og konstanter

(Noe av dette kan du få bruk for)

Harmonisk oscillator-egenskaper

(1) *Bølgefunksjoner*

Egenfunksjonene i posisjonsrommet for en partikkel med masse m i potensialet $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ for de tre laveste energinivåene er

$$\langle q|0\rangle = \psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$
$$\langle q|1\rangle = \psi_1(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2}xe^{-\frac{x^2}{2}}$$
$$\langle q|2\rangle = \psi_2(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}(2x^2-1)e^{-\frac{x^2}{2}}$$

med $x = q\sqrt{m\omega/\hbar}$. (Tidsavhengigheten er neglisjert).

(2) *Skapelses- og annihilasjonsoperatorer*

kan defineres ved posisjons- og impuls-operatorene:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p$$
$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p,$$

og har egenskapene

$$a|n\rangle = \sqrt{n}e^{-i\omega t}\,|n-1\rangle$$
$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}e^{i\omega t}\,|n+1\rangle$$

Grunntilstand i lineære potensial

Den eksakte Airy-funksjonsløsning $\varphi(x)$ av

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2} + |x|\varphi = \hat{E}\varphi$$

på intervallet $(-\infty, +\infty)$ har

$$\hat{E}_0 = 1.01879297...$$
$$\hat{E}_1 = 2.33810741...$$

som de laveste egenverdier. Pariteten av de tilsvarende bølgefunksjoner er henholdsvis like og odde: $\varphi_0(-x) = \varphi_0(x)$, og $\varphi_1(-x) = -\varphi_1(x)$.

Finstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137.05}.$$

Dirac-likningen

Diraclikningen for en partikkel med masse m og ladning $-e$ er

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi,$$

med

$$H = c\vec{\alpha}(\vec{p} + e\vec{A}) + \beta mc^2 - e\varphi.$$

Her er $\vec{A}$ og φ de elektromagnetiske potensialer, og matrisene α_1, α_2, α_3 og β antikommuterer med hverandre og har kvadrat 1.