NTNU

Institutt for fysikk

Fakultet for naturvitenskap og teknologi

Løsningsforslag til eksamen i TFY4205 Kvantemekanikk

12. august 2004

Dette løsningsforslaget er på 6 sider.

Oppgave 1. To-dimensjonal elektron-gass

a) Hamilton-operatoren er

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[(\hat{p}_x - qA_x)^2 + (\hat{p}_y - qA_y)^2\right] , \tag{1}$$

der $\hat{p}_x$ og $\hat{p}_y$ er impuls-operatorer langs x- og y-retningen og magnet-feltet er gitt ved $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Vi bruker en sirkulær justering, slik at

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(-yB, xB, 0) . \tag{2}$$

I denne justeringen ser vi at

$$\begin{aligned} \hat{p}_x A_x &= 0 \\ \hat{p}_y A_y &= 0 \end{aligned}$$

slik at vi kan skrive Hamilton-operatoren på formen

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 - qA_x\hat{p}_x - qA_y\hat{p}_y + q^2A_x^2 + q^2A_y^2\right] , \tag{3}$$

Vi bruker sirkulære koordinater slik at $x = r\cos\varphi$ og $y = r\sin\varphi$. Den inverse transformasjonen er dermed $r = \sqrt{x^2+y^2}$ $\varphi = \arctan(y/x)$. Enhetsvektorene for polar-koordinatene er $\vec{e}_r = (\cos\varphi, \sin\varphi, 0)$ og $\vec{e}_\varphi = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)$. I polar-koordinat-basisen finner vi dermed $A_\varphi = \frac{1}{2}rB$ og $A_r = 0$. Vi må transformere impuls-operatorene:

$$\vec{e}_x\hat{p}_x + \vec{e}_y\hat{p}_y = \vec{e}_r\hat{p}_r + \vec{e}_\varphi\hat{p}_\varphi.$$

Vi finner

$$\begin{aligned}
\hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\frac{y}{x^2}}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] \\
\hat{p}_y &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\frac{1}{x}}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right]
\end{aligned}$$

Vi finner dermed

$$\begin{aligned}
\hat{p}_r &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r} \\
\hat{p}_\varphi &= \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}$$

Den kvadratiske impul-operatoren blir

$$\begin{aligned}
\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 &= (\vec{e}_r\hat{p}_r + \vec{e}_\varphi\hat{p}_\varphi)^2 \\
&= \hat{p}_r^2 + \hat{p}_\varphi^2 + \vec{e}_r\cdot\vec{e}_\varphi\hat{p}_r\hat{p}_\varphi + \vec{e}_\varphi\hat{p}_\varphi\vec{e}_r\hat{p}_r \\
&= \hat{p}_r^2 + \hat{p}_\varphi^2 + \vec{e}_\varphi\cdot(\hat{p}_\varphi\vec{e}_r)\,\hat{p}_r \\
&= \hat{p}_r^2 + \hat{p}_\varphi^2 + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\hat{p}_r \\
&= -\hbar^2\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]
\end{aligned}$$

I tillegg har vi

$$\begin{aligned}
-qA_xp_x - qA_yp_y + q^2A_x^2 + q^2A_y^2 &= -qA_\varphi p_\varphi + q^2A_\varphi^2 \\
&= -q\frac{1}{2}rB\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} + q^2\frac{1}{4}r^2B^2
\end{aligned}$$

Schrødinger ligningen kan dermed skrives som

$$\hat{H}(r,\theta)\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta)\,, \tag{4}$$

der

$$\hat{H}(r,\theta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] - q\frac{1}{4m}B\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi} + q^2\frac{1}{8m}r^2B^2 \tag{5}$$

Vi introduserer den magnetiske lengden

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{qB}}$$

dvs. $l_B^2 = \hbar/qB$ og finner at Hamilton-operatoren kan skrives som

$$\hat{H}(r,\theta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ir}{2l_B^2}\right)^2\right]. \tag{6}$$

b) Bølgefunksjonen må være en-entydig. Det betyr at

$$\psi(r,\theta+2\pi) = \psi(r,\theta)$$

slik at kvantetallet l må tilfredsstille

$$\exp(il2\pi) = 1$$

dvs. at l må være et heltall.

c) Med dimensjonsløs variabel $r = l_B x$ blir ligningen for $\chi(x)$

$$\left[\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx} - \frac{l^2}{x^2} - l - \frac{1}{4}x^2 + \epsilon\right]\chi(x) = 0$$

Vi antar videre at

$$\chi(x) = P(x)\exp(-x^2/4).$$

Ligningen for $P(x)$ blir dermed

$$P'' + \left(\frac{1}{x} - x\right)P' - \frac{l^2}{x^2}P + (l+1-\epsilon)\,P = 0.$$

Oppgave 2. Fullstendighetsrelasjoner

a) Vi bruker fullstendighetsrelasjonen

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = 1$$

til å finne at en vilkårlig tilstand kan utvikles som

$$|\psi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle.$$

b) Ved hjelp av fullstendighetsrelasjonen har vi

$$\langle s|\hat{x}^2|s\rangle = \sum_k \langle s|\hat{x}|k\rangle\langle k|\hat{x}|s\rangle = \sum_k |\langle k|\hat{x}|s\rangle|^2 .$$

c) Vi har $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$ som stemmer med formelen for $n = 1$. Vi bruker induksjonsbevis for generell n:

$$\begin{aligned}[\hat{p}_x^n, \hat{x}] &= \hat{p}_x^n\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^n = \hat{p}_x\left[\hat{p}_x^{n-1}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^{n-1}\right] + [\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x]\,\hat{p}_x^{n-1} \\ &= \hat{p}_x\left(-i\hbar\,(n-1)\,\hat{p}_x^{n-2}\right) - i\hbar\hat{p}_x^{n-1} \\ &= -i\hbar n\hat{p}_x^{n-1}.\end{aligned}$$

Vi ser at dette stemmer. Tilsvarende for vi for kommutatorene

$$\begin{aligned}\left[\left[\hat{x},\hat{H}^0\right],\hat{x}\right] &= \left[\left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m}+V(\hat{x},\hat{y},\hat{z})\right],\hat{x}\right]\\ &= \left[\left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right],\hat{x}\right]\\ &= \frac{1}{2m}\left[i\hbar 2\hat{p}_x,\hat{x}\right]=\frac{i\hbar}{m}(-i\hbar)\\ &= \frac{\hbar^2}{m}.\end{aligned}$$

d) Vi benytter identiteten

$$\left[\left[\hat{x},\hat{H}^0\right],\hat{x}\right]=2\hat{x}\hat{H}^0\hat{x}-\hat{H}^0\hat{x}^2-\hat{x}^2\hat{H}^0$$

og finner

$$\begin{aligned}\langle s|\left[\left[\hat{x},\hat{H}^0\right],\hat{x}\right]|s\rangle &= 2\langle s|\hat{x}\hat{H}^0\hat{x}|s\rangle-\langle s|\hat{H}^0\hat{x}^2|s\rangle-\langle s|\hat{x}^2\hat{H}^0|s\rangle\\ \frac{\hbar^2}{m} &= 2\sum_k\langle s|\hat{x}\hat{H}^0|k\rangle\langle k|\hat{x}|s\rangle-2E_s\langle s|\hat{x}^2|s\rangle\\ &= 2\sum_k\left(E_k-E_s\right)\langle s|\hat{x}|k\rangle\langle k|\hat{x}|s\rangle\\ 1 &= \frac{2m}{\hbar^2}\sum_k\left(E_k-E_s\right)|x_{ks}|^2\end{aligned}$$

som skulle vises.

Oppgave 3. Tidsavhengig perturbasjonsteori

a) Se forelesningsnotatene. Innsatt i Schrødinger-ligningen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_m a_m(t)\Psi_m^0(\vec{r},t)=\left(\hat{H}^0+V(\vec{r},t)\right)\sum_m a_m(t)\Psi_m^0(\vec{r},t)$$

gir

$$\sum_m\left(i\hbar\dot{a}_m\Psi_m^0+E_m a_m\Psi_m^0\right)=\sum_m\left(E_m a_m\Psi_m^0+a_m V\Psi_m^0\right)$$

Vi kan stryke like ledd på begge sider av ligningen:

$$\sum_m i\hbar\dot{a}_m\Psi_m^0=\sum_m a_m V\Psi_m^0$$

Anvendelse av

$$\frac{1}{i\hbar}\int d^3r\left(\Psi_k^0\right)^*\exp(-iE_kt/\hbar)..$$

gir

$$\dot{a}_k(t)=\frac{1}{i\hbar}\sum_m a_m(t)V_{km}(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(E_k-E_m\right)t\right]$$

når settet $\Psi_k^0(\vec{r})$ er normert. Integrasjon gir så

$$a_k(t) = a_k(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\sum_m \int_{t_0}^{t} d\tau a_m(\tau) V_{km}(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)\tau\right].$$

For små $V_{km}(t)$ kan vi sette 0-te ordens verdien $a_k(t) \approx a_k(t_0)$ inn i integralet og få $a_k(t)$ til 1. orden i $V_{km}(t)$:

$$a_k(t) = a_k(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\sum_m a_m(t_0) \int_{t_0}^{t} d\tau V_{km}(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)\tau\right].$$

$|a_k(t)|$ gir sannsynligheten for at systemet skal være i tilstanden $\Psi_k^0(\vec{r})$ ved tiden t.

b) Vekselvirkningen mellom partikkelen og elektronet i atomet er

$$V\left(\vec{r}, \vec{R}\right) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\left|\vec{R} - \vec{r}\right|},$$

der posisjonen til partikkelen er

$$\vec{R} = \vec{b} + \vec{v}t$$

Vi ser bort fra vekselvirkningen mellom partikkelen og atomkjernen. Ved $t = t_0 = -\infty$ er elektronet i tilstanden Ψ_s: $a_m(t_0) = \delta_{ms}$. Etter passeringen er da (for $k \neq s$ og med $\omega_{ks} = (E_k - E_s)/\hbar$)

$$a_k(\infty) = -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega_{ks}\tau} \int d^3r \left(\Psi_k^0(\vec{r})\right)^* \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r^l}{R^{l+1}(\tau)} P_l(\cos\theta)\,\Psi_s^0(\vec{r}).$$

Vi regner med at partikkelen passerer helt utenfor atomet $R \geq b \geq r_0$ med r_0 slik at $|\Psi(\vec{r})|^2 \approx 0$ for $r \geq r_0$. For $b \gg r_0$ trenger vi bare leddet $l = 1$ og får

$$a_k(\infty) = -\frac{1}{i\hbar}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega_{ks}\tau} \int d^3r \left(\Psi_k^0(\vec{r})\right)^* \frac{r}{R^2(\tau)} P_1(\cos\theta)\Psi_s^0(\vec{r}).$$

Vi har

$$rP_1(\cos\theta) = \vec{r}\cdot\hat{R} = x\sin\theta + z\cos\theta,$$

der vinkelen er tidsavhengig $\theta = \theta(\tau)$. Monopol-delen $l = 0$ gir intet bidrag til eksitasjonen da $\int d^3r \left(\Psi_k^0(\vec{r})\right)^* \Psi_s^0(\vec{r}) = \delta_{ks}$ som er 0 for $k \neq s$. Vi får altså

$$a_k(\infty) = \frac{iZe^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{e^{i\omega_{ks}\tau}}{R^2(\tau)}\left(\sin\theta \int d^3r \left(\Psi_k^0(\vec{r})\right)^* x\Psi_s^0(\vec{r}) + \cos\theta \int d^3r \left(\Psi_k^0(\vec{r})\right)^* z\Psi_s^0(\vec{r})\right).$$

Vi setter inn $e^{i\omega_{ks}\tau} \approx 1$ og innfører $\theta = \theta(\tau)$ som integrasjonsvariabel, $d\tau = d\theta\,(d\tau/d\theta)$:

$$\begin{aligned} a_k(\infty) &= \frac{iZe^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\int_{\pi}^{0} d\theta \frac{x_{ks}\sin\theta + z_{ks}\cos\theta}{R^2\frac{d\tau}{d\theta}} \\ &= \frac{iZe^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\frac{-2x_{ks}}{R^2\frac{d\tau}{d\theta}} \end{aligned}$$

siden $R^2 \frac{d\tau}{d\theta} = bv$ =konstant. Med dette innsatt gir den oppgitte $a_k(\infty)$ også sannsynligheten for at H-atomet skal være eksitert til tilstand $\Psi_k^0(\vec{r})$:

$$|a_k(\infty)|^2 = \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar} \frac{x_{ks}}{bv} \right)^2 .$$

c) Det totale energitap ved eksitasjon til tilstandene $\Psi_k^0(\vec{r})$ blir da

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \sum_k (E_k - E_s)\,|a_k(\infty)|^2 = \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar} \frac{1}{bv} \right)^2 \sum_k (E_k - E_s)\,|x_{ks}|^2 \\ &= \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar} \frac{1}{bv} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \\ &= \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{2}{mv^2b^2} . \end{aligned}$$