

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

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

med  $A_s = \frac{3}{10m_e} \hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}$  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  $C_2$ .

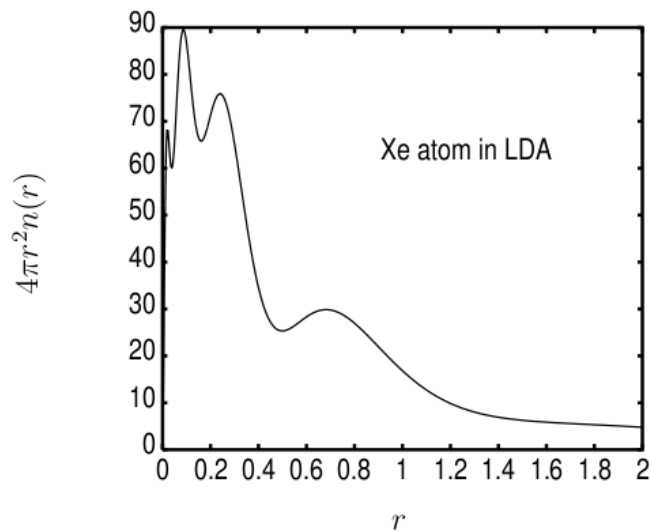
d) Finn en approksimasjon for grunntilstandsenergien  $E_{\text{GS}}$  og grunntilstandselektrontettheten  $n_{\text{GS}}(r)$  som funksjoner av  $N$  og  $Z$ .

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  $\Psi$  er en *tokomponents* bølgefunksjon, og  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , hvor  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ ) 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 dipolapprosimasjonen?

## Oppgitt

### Noen fundamentale konstanter og omregningsfaktorer

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

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

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

$$\epsilon_0 = 8,85419 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$$

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

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

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

### 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  $C_2$ .

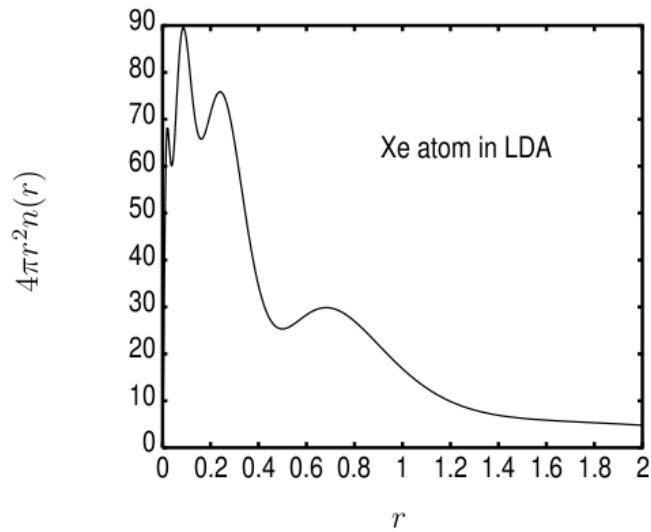
- d) Find an approximation for the ground state energy  $E_{\text{GS}}$  and the ground state electron density  $n_{\text{GS}}(r)$  as functions of  $N$  and  $Z$ .

- 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  $\Psi$  is a *twocomponent* wave-function, and  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , where  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ ) 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  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$ ,  $a_{\mathbf{k}, \lambda}$ , or  $a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$  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

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